

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE FERHAT ABBAS-SETIF

THESE

Présentée à la Faculté des sciences
Département de Physique
Pour l'Obtention du Diplôme de

DOCTORAT

Option : Physique théorique

Par

Mr. Yahia SAADI

THEME

**Systèmes quantiques dépendant du temps
Cas du spectre continu**

Soutenue le : 27/01/2013

Devant le Jury

Pr. A. BOUCENNA	Président	Université Ferhat Abbas Sétif.
Pr. M. MAAMACHE	Rapporteur	Université Ferhat Abbas Sétif.
Pr. P-A. HERVIEUX	Examineur	Université de Strasbourg, France.
Pr. A. MANSOURI	Examineur	Université Ferhat Abbas Sétif.
Pr. J-P. PROVOST	Examineur	Université de Nice, France.
Pr. K. H. YEON	Examineur	Université nationale de Chungbuk, Corée du Sud.
Pr. K. BENCHEIKH	Invité	Université Ferhat Abbas 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 **Mustapha MAAMACHE**, 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 **Ahmed BOUCENNA**, professeur à l'université de Sétif, qui me fait le grand honneur d'accepter la présidence du jury.*

*Messieurs **Paul-Antoine HERVIEUX**, **Abdelaziz MANSOURI**, **Jean-Pierre PROVOST**, **Kyu Hwang YEON** et **Kamel BENCHEIKH** pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de participer à ce jury.*

J'adresse mes vifs remerciements 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 Ellawi et Mme. Boucenène.

DEDICACES

Je dédie ce travail à ma femme pour tout ce qu'elle a fait pour moi ainsi que ma petite fille Jana Chahd.

Je le dédie à mon père pour tout ce qu'il a fait pour que je puisse arriver à ce niveau, ainsi qu'à l'esprit de ma mère.

Je le dédit à mon beau-père et à ma belle-mère pour leurs soutiens.

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 tous ceux qui aiment Yahia et ceux que Yahia aime.

Yahia

TABLE DES MATIERES

<i>REMERCIEMENTS</i>	ii
<i>DEDICACES</i>	iii
TABLE DES MATIERES	v
INTRODUCTION	7
CH I - GENERALISATION DU THEOREME ADIABATIQUE POUR LE SPECTRE CONTINU	12
I. Les méthodes d'approximation :	12
1) <i>La nécessité des méthodes approximatives :</i>	12
1. La théorie des perturbations dépendant du temps :	12
2. L'approximation soudaine :	12
3.	12
4. L'approximation adiabatique :	12
II. Approximation adiabatique :	12
1) <i>L'approximation adiabatique en mécanique quantique :</i>	12
2) <i>Le théorème adiabatique dans le cas du spectre discret :</i>	13
1. L'énoncé du théorème adiabatique :	14
2. Démonstration du théorème adiabatique :	14
3. Validité de l'approximation adiabatique :	15
III. Les applications du théorème adiabatique :	15
IV. L'approximation adiabatique pour le spectre continu :	16
1) <i>Introduction :</i>	16
2) <i>Le théorème adiabatique dans le cas du spectre continu :</i>	17
1. Le théorème adiabatique sans la condition du gap	17
2. Le théorème adiabatique généralisé pour le spectre continu :	18
3. L'énoncé du théorème adiabatique généralisé :	20
4. Démonstration du théorème adiabatique généralisé :	21
a) <i>Représentation des axes tournants :</i>	21
b) <i>Démonstration du théorème :</i>	22
c) <i>L'approximation adiabatique :</i>	25
3) <i>Solution de l'équation de Schrödinger :</i>	26
CH II - GENERALISATION DE LA THEORIE DES INVARIANTS POUR LE SPECTRE CONTINU	31
I. Introduction :	31
II. La théorie de Lewis-Riesenfeld :	32
1) <i>Exposition de la méthode :</i>	32
2) <i>La recherche de l'invariant :</i>	35
3) <i>Nouvelle approche</i>	36
III. La théorie des invariants pour le spectre continu:	38
1) <i>Introduction :</i>	38
2) <i>Discussion des travaux précédents :</i>	40
3) <i>Généralisation de la théorie des invariants</i>	41
CH III - LA PHASE GEOMETRIQUE GENERALISEE	47
I. Introduction	47

II. Le cas adiabatique :	47
1) <i>La phase de Berry dans le cas discret :</i>	47
2) <i>Interprétation de La phase de Berry :</i>	48
3) <i>les différentes applications de La phase de Berry :</i>	50
4) <i>La phase de Berry pour le spectre continu :</i>	51
III. Le cas non-adiabatique :	54
1) <i>Introduction :</i>	54
1. <i>Systèmes non cycliques :</i>	54
2. <i>Systèmes non hermitiens :</i>	54
3. <i>Autres généralisations :</i>	55
2) <i>La phase géométrique de Aharonov-Anandan :</i>	55
3) <i>La phase géométrique de Aharonov-Anandan pour le spectre continu :</i>	58
4) <i>Lien entre la phase géométrique de Aharonov-Anandan et la théorie des invariants :</i>	58
CH IV - ASPECT GEOMETRIQUE DE LA MATRICE S	63
I. Introduction :	63
II. L'aspect géométrique de la matrice S :	64
1) <i>Représentation interaction et matrice S :</i>	64
2) <i>Le cas adiabatique :</i>	68
3) <i>Le cas non-adiabatique :</i>	68
4) <i>Discussion :</i>	71
CH V - APPLICATIONS	74
I. Introduction :	74
II. L'équation de Dirac dans un champ électromagnétique :	74
1) <i>Description du problème :</i>	74
2) <i>Recherche des vecteurs et valeurs propres :</i>	75
3) <i>Calcul de la phase géométrique généralisée :</i>	76
4) <i>Interprétation de la phase géométrique généralisée :</i>	77
5) <i>La limite non relativiste :</i>	78
III. Une particule dans un champ homogène :	80
1) <i>Le potentiel linéaire dans la littérature :</i>	80
2) <i>Application de la théorie des invariants généralisée :</i>	82
IV. Diffusion par le potentiel de Pöschl-Teller modifié :	85
1) <i>Approche indépendant du temps (solution exacte) :</i>	86
2) <i>Approche dépendant du temps :</i>	87
1. Le cas adiabatique	88
2. Le cas non-adiabatique	91
CONCLUSION	93
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	95
ARTICLE I : ADIABATIC THEOREM AND GENERALIZED GEOMETRICAL PHASE IN THE CASE OF CONTINUOUS SPECTRA	100
ARTICLE II : QUANTAL PHASE FACTORS ACCOMPANYING ADIABATIC CHANGES IN THE CASE OF CONTINUOUS SPECTRA	104
ARTICLE III : NON-ADIABATIC QUANTUM EVOLUTION: THE S MATRIX AS A GEOMETRICAL PHASE FACTOR	113
ARTICLE IV : TIME DEPENDENT SYSTEMS WITH CONTINUOUS SPECTRA: SOME APPLICATIONS	120

INTRODUCTION

On appelle un système quantique dépendant du temps tout système quantique régi par l'équation de Schrödinger

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

où l'Hamiltonien $H(t)$ dépend explicitement du temps à travers un ensemble de paramètres dépendant du temps $\{X_i(t), i = 1, 2, \dots\}$, ces derniers peuvent représenter l'interaction du système considéré avec des champs externes dépendant du temps (champ électrique, champ magnétique, ...) ou, tout simplement, des paramètres internes dépendant du temps (la masse, la charge, la profondeur d'un puits de potentiel, ...) [1-3]. En générale, l'objectif des systèmes dépendant du temps est de trouver les fonctions $|\psi(t)\rangle$ vérifiant l'équation de Schrödinger (1) et correspondant à la condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$. Cela est aussi équivalent à trouver l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ vérifiant

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (2)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (3)$$

$$U(t_0, t_0) = I \quad (4)$$

En réalité, résoudre l'équation de Schrödinger (1) ou son équivalent (3) présente des difficultés mathématiques énormes ; pour illustrer cette affirmation, prenons l'exemple le plus simple et connu en mécanique quantique, celui de l'oscillateur harmonique à une dimension dont l'Hamiltonien est donné par [4-6]

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}m(t)\omega(t)^2 x^2 \quad (5)$$

On montre que cet Hamiltonien admet comme états propres les fonctions suivantes [4-6]

$$\varphi_n(x, t) = \left(\frac{\beta(t)^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\beta(t)^2 x^2}{2\hbar}} \chi_n(\beta(t)x) \quad (6)$$

où les χ_n sont les polynômes d'Hermite [7] et

$$\beta(t) = \sqrt{\frac{m(t)\omega(t)}{\hbar}} \quad (7)$$

avec les valeurs propres suivantes

$$E_n(t) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega(t) \quad (8)$$

En utilisant les propriétés des polynômes d'Hermite [7], on montre que les coefficients du développement

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\varphi_n(t)\rangle \quad (9)$$

sont donnés par

$$i\dot{C}_0(t) = C_0(t)E_0(t) + iC_2(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{2}}{\beta(t)} \quad (10-a)$$

$$i\dot{C}_1(t) = C_1(t)E_1(t) + iC_3(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{6}}{\beta(t)} \quad (10-b)$$

$$i\dot{C}_n(t) = C_n(t)E_n(t) - iC_{n-2}(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{n(n-1)}}{\beta(t)} + C_{n+2}(t)\frac{\dot{\beta}(t)\sqrt{(n+2)(n+1)}}{\beta(t)} \quad (10-c)$$

Il est clair que ce système n'admet pas une solution analytique.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps (1), plusieurs méthodes exactes et d'approximation ont été proposées. Entre autres, deux méthodes ont eu intérêt considérable que ce soit sur le plan théorique ou expérimental, à savoir l'approximation adiabatique reposant sur le théorème adiabatique et la théorie des invariants de Lewis et Riesenfeld [8, 9]. L'importance des deux méthodes vient du fait que le problème (1) se réduit à un problème de calcul de phases, en particulier la partie dite géométrique.

Les phases géométriques, prévu par S. Pancharatnam [10] dans son étude de l'interférence de la lumière classique dans des états de polarisations distincts, continuent à faire l'objet d'un grand intérêt. Les phases géométriques relatives à la mécanique quantique, découvertes par M. V. Berry [11] dans le contexte d'une évolution adiabatique, unitaire et cyclique d'un système quantique dépendant du temps, représentent l'un des développements les plus intéressants au cours des 30 dernières années. Dans son article, Berry a montré qu'un état propre d'un Hamiltonien dépendant d'un ensemble de paramètres cycliques variant de façon adiabatique en fonction du temps acquiert à la fois la phase dynamique bien connue et une phase invariante de jauge qui ne dépend que de la géométrie du chemin suivi par l'Hamiltonien dans l'espace des paramètres. L'explication mathématique de cette phase géométrique a été rapidement donnée par B. Simon [12]. Quelques années plus tard et en rejetant l'hypothèse d'adiabaticité, Y. Aharonov et J. Anandan [13] ont généralisé le résultat de Berry pour toute évolution temporelle d'un système quantique. Aharonov et Anandan ont

examiné le cas cyclique non-adiabatique et ont souligné que la phase géométrique est due à la courbure de l'espace des états quantiques purs. Les techniques de nano-fabrication modernes ont permis d'étudier les interférences quantiques, et donc les phases géométriques quantiques dans les dispositifs électroniques mésoscopiques. Les effets célèbres de Aharonov-Bohm [14-17] et Aharonov-Casher sont des exemples pertinents, de même que la phase de Berry acquis par un système quantique adiabatique lors de la variation cyclique d'un paramètre extérieur. La phase de Aharonov et Anandan a été récemment détectée expérimentalement à l'aide de l'interférométrie RMN [18].

L'étude des phases géométriques a, jusqu'ici, été confinés aux spectres discret. Cela est dû au fait que le théorème adiabatique n'a été démontré que pour les systèmes vérifiant la condition du gap entre les états du spectre discret. Dans le cas non-adiabatique, où aucune condition n'est imposé, l'application de la théorie des invariants pour le cas du spectre continu n'est apparue que dans un nombre très limité de travaux dans la littérature où de sérieux problèmes ont émergé à cause de la généralisation directe de la théorie de Lewis et Riesenfeld démontrée seulement pour le cas du spectre discret. L'étude de la phase géométrique dans le cas du spectre continu a été faite pour la première fois par R. G. Newton [19] qui a trouvé un lien implicite entre cette phase et la matrice S de diffusion où il a montré que l'expression de la phase géométrique est étonnamment semblable à l'équation de l'opérateur d'onde dans la représentation interaction. Ensuite, G. Ghosh [20] a étendu l'approximation adiabatique pour les spectres continus comme un *ansatz* et s'est limité au problème de la diffusion par un potentiel unidimensionnel sans réflexion.

L'objectif de ce travail est de traiter les systèmes quantiques dépendant du temps dans les cas où les spectres sont continus en généralisant tous les résultats décrits ci-dessus. à savoir ; le théorème adiabatique, la théorie des invariant et les phases géométriques (de Berry dans le cas adiabatique et de Aharonov-Anandan dans le cas non-adiabatique). Le travail est organisé comme suit :

Le premier chapitre est consacré à l'approximation adiabatique où on va tout d'abord rappeler le théorème adiabatique dans le cas du spectre discret. Après avoir discuté les problèmes liés à l'application de ce théorème dans le cas du spectre continu, on va proposer une forme généralisée du théorème adiabatique. Ensuite, on va démontrer et donner les conditions de validité de ce nouveau théorème [21-23].

Le deuxième chapitre est consacré à la généralisation de la théorie des invariants pour le cas du spectre continu. Pour faire, on va donner une nouvelle approche pour la théorie de Lewis et Riesenfeld reposant sur l'idée de l'invariance des projecteurs liés à l'opérateur invariant. Cela est fait, la généralisation au cas du spectre continu se déduit par analogie [23-26]. Le chapitre est aussi consacré à la discussion détaillée des différents travaux antérieurs.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude des phases géométrique dans le cas du spectre continu. Ce dernier contient deux sections principales : dans la première section, on va s'intéresser à la phase géométrique dans le cadre de l'approximation adiabatique où on va appliquer les résultats du premier chapitre pour généraliser la phase géométrique de Berry. Dans la deuxième section, on va utiliser les résultats du deuxième chapitre pour trouver une base des états cycliques en termes des fonctions propres de l'invariant pour généraliser la phase géométrique de Aharonov-Anandan pour le cas du spectre continu.

Dans le quatrième chapitre et en utilisant les résultats des trois premiers chapitres, on va démontrer l'aspect géométrique de la matrice S dans les deux cas adiabatique et non-adiabatique. Si le cas adiabatique a été déjà traité dans la littérature par R. G. Newton et G. Ghosh, le cas non-adiabatique sera, à notre connaissance, traité pour la première fois dans le cadre de ce travail [23, 24].

Finalement, On propose trois exemples d'application pour illustrer les différents résultats obtenus dans ce travail ; dans le premier on va calculer la phase géométrique généralisée pour un système décrit par l'équation de Dirac dans un champ électromagnétique dépendant du temps. Dans le deuxième, on va étudier le problème d'une particule soumise à un potentiel linéaire. Finalement, on va étudier la diffusion d'une particule par le potentiel de Pöschl-Teller modifié dans les deux cas adiabatique et non-adiabatique.

Chapitre I

Généralisation du théorème adiabatique pour le spectre continu

CH I - GENERALISATION DU THEOREME ADIABATIQUE POUR LE SPECTRE CONTINU

I. Les méthodes d'approximation :

1) *La nécessité des méthodes approximatives :*

Toutes les méthodes exactes proposées pour la résolution de l'équation (1) se ressemblent dans le fait qu'elles sont soit formelles soit elles ne sont applicables que pour des cas limités [27-29]. 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 [30], physique des plasmas, l'information quantique [31-33]...etc. Entre autres, on cite

1. La théorie des perturbations dépendant du temps :

2. L'approximation soudaine :

3. ...

4. L'approximation adiabatique :

II. Approximation adiabatique :

1) *L'approximation adiabatique en mécanique quantique :*

Les premiers travaux sur l'approximation adiabatique en mécanique quantique sont dus à M. Born et V. Fock [34] qui ont fait une extension des travaux d'Ehrenfest [35] en mécanique classique et l'ancienne théorie des Quanta [1-3, 28]. Dès lors, aucune intention pour examiner l'approximation adiabatique n'est concernée. Mais à partir des années cinquante, il y avait eu un réveil d'intérêt intense dans le sujet [36]. Des applications pratiques ont été trouvées en physique des plasmas, technologie de fusion, accélérateurs des particules chargées, et même dans l'astronomie galactique [38].

Supposons maintenant que les paramètres $\{X_i(t), i = 1, 2, \dots\}$ varient lentement en fonction du temps. Posons

$$T = t_f - t_0 \tag{11}$$

le temps nécessaire pour effectuer l'évolution entre l'instant initial et un instant final t_f et qui vérifie $T \gg$ (modification adiabatique). Pour des raisons qui seront claires par la suite, passons à

$$s = \frac{t-t_0}{T} \quad (12)$$

qui vérifie

$$s \in [0,1] \quad (13)$$

Ainsi, on a deux types de temps, ou plus exactement deux échelles de temps [3], à savoir

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

Le paramètre adiabatique T contrôle le décalage entre les deux échelles [1, 3].

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

$$\frac{i\hbar}{T} \frac{\partial}{\partial s} |\psi(s)\rangle = H(s) |\psi(s)\rangle \quad (14)$$

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

La question qui se pose maintenant est de savoir quelle forme va prendre la fonction d'onde lorsque le paramètre adiabatique est très grand $T \gg$? D'après la théorie des perturbations, on montre que la probabilité de transition du système d'un état à un autre tend vers zéro lorsque la perturbation est assez lente [1, 6, 28, 36]. La généralisation de cet important résultat pour un système dépendant du temps dans le cas général constitue *le théorème adiabatique* sur lequel repose toute l'approximation adiabatique.

2) *Le théorème adiabatique dans le cas du spectre discret :*

C'est l'un des plus anciens et importants théorèmes en mécanique quantique [1, 39], et qui est largement appliqué soit en physique théorique ou expérimentale [40]. Il s'agit d'une propriété des états du *spectre discret* de l'Hamiltonien d'un système subissant une évolution adiabatique [1, 3, 36].

Dans l'échelle microscopique, l'opérateur d'évolution s'écrit comme suit

$$U(t, t_0) = U_T(s) \quad (15)$$

Le but de l'approximation adiabatique est, essentiellement, de déterminer l'opérateur d'évolution $U_T(1)$ et d'examiner sa dépendance en fonction de T .

Désignons par $E_n(s)$ les valeurs propres constituant le spectre de $H(s)$ supposé entièrement discret, et par $P_n(s)$ les projecteurs sur leurs sous-espaces respectifs. Ce sont par hypothèse des fonctions *continues* de s . On suppose, en outre, que [1, 36]

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

$$\forall s / 0 \leq s \leq 1 : E_n(s) \neq E_m(s), \quad \forall n \text{ et } m \quad (16)$$

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

1. L'énoncé du théorème adiabatique :

Dans la limite $T \rightarrow \infty$, le théorème adiabatique stipule [1, 6, 11, 41]

« Si le système se trouve à l'instant initial dans un état propre de $H(0)$, il passe à l'instant t_1 , sous les conditions précisées ci-dessus, dans l'état propre de $H(1)$ qui s'en déduit par *continuité* ».

Ainsi, 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* [1, 11, 36, 42-44], tandis que sa valeur propre évolue continûment [39] ; les vecteurs propres constituent donc de bonnes approximations de la solution exacte pour un système adiabatique [43]. Ce résultat est dû au fait que la modification adiabatique prend lieu dans un temps assez long de sorte que la transition entre les différents niveaux d'énergie soit négligeable [2].

2. Démonstration du théorème adiabatique :

En supposant les conditions indiquées plus haut de continuité, de non croisement et de dérivabilité vérifiées, Le théorème adiabatique stipule que l'opérateur d'évolution $U_T(s)$ possède la propriété asymptotique suivante [3, 5, 36, 38, 41]

$$\forall k \in I : \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) P_n(0) = P_n(s) \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) \quad (17)$$

Le théorème adiabatique a connu plusieurs démonstrations dans la littérature [45] ; la première démonstration dans le cadre de la mécanique quantique moderne est dû à M. Born et V. Fock [34]. En 1961, L. Landau a donné une démonstration du théorème dans le cadre de la limite quasi-classique [6]. Une autre démonstration est donnée par [6, 28] dans le cas où la modification adiabatique est considérée une perturbation. Parmi les démonstrations les plus récentes on peut citer la démonstration de Reichardt [46] et celle A. Ambainis et O. Regev [45] qui trouvent leurs application surtout en information quantique.

3. Validité de l'approximation adiabatique :

Si on se tient au premier ordre, l'approximation adiabatique est assurée par la condition suivante [1, 2, 40]

$$\left| \frac{\hbar \langle \varphi_n(t) | \dot{\varphi}_m(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \right| \ll 1, \quad \forall n \neq m, t \in [t_0, t_f] \quad (18)$$

Ainsi, l'ordre de grandeur de l'erreur commise dans l'approximation adiabatique ne dépend que des quantités $\langle \varphi_n(t) | \dot{\varphi}_m(t) \rangle$ qui représentent les vitesses de rotation des axes propres de l'Hamiltonien et les fréquences de Bohr correspondant aux transitions $n \rightarrow m$ représentées par les différences $E_n(t) - E_m(t)$ [3].

III. Les applications du théorème adiabatique :

L'application du théorème adiabatique a connu un intérêt croissant dans les différents domaines de la physique [3, 40], tels que la transition de Landau-Zener en physique moléculaire [39], la théorie quantique des champs [42, 47, 48], l'électrodynamique quantique [3, 49, 50], physique nucléaire et chimie physique [42]. Parmi ses applications les plus récentes on cite : l'effet Hall quantique [3, 41] ; où les auteurs de [41] ont montré que le flux moyenné du transport de charge est un nombre entier dans la limite adiabatique. L'information quantique [48] ; telle que l'information quantique géométrique [39], les problèmes d'optimisation [45] et la construction de nouveaux algorithmes basés sur l'approximation adiabatique [39]. Finalement, on a la phase géométrique de Berry [11], qui constitue l'une des plus importantes applications du théorème adiabatique [51], et pour laquelle on va consacrer le troisième chapitre.

IV. L'approximation adiabatique pour le spectre continu :

1) *Introduction :*

L'histoire du théorème adiabatique dans la mécanique quantique a débuté avec les travaux de M. Born et V. Fock qui l'ont montré pour les Hamiltoniens bornés ayant des spectres purement discrets et non dégénérés [41, 52]. En 1950 T. Kato a généralisé ce travail en introduisant un caractère purement *géométrique* à l'évolution adiabatique [53]. D'après T. Kato, le contenu du théorème adiabatique incarne deux parties : premièrement, l'existence d'un changement virtuel du système qui peut être appelé une transformation adiabatique, et, d'autre part, la transformation dynamique du système qui passe à travers une transformation adiabatique dans la limite où l'évolution de l'Hamiltonien est infiniment lente.

En utilisant cette idée, Kato a prolongé le domaine d'application aux Hamiltoniens qui contiennent des parties continues en plus du spectre discret à condition que le système soit initialement dans les régions discrètes [36, 41, 49, 52]. 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 2 ; de telles situations sont rencontrées souvent en physique atomique.

Plusieurs auteurs [32, 58] ont officiellement étendu les résultats de Kato concernant la validité de l'approximation adiabatique lorsque le temps T est grand mais fini. A. Lenard [54], L. M. Garrido [55] et S. J. Sancho [56] ont formellement prolongé le travail de Kato à des ordres supérieurs en $\frac{1}{T}$ [3]. Pour des Hamiltoniens $H(t)$ analytiques en t , L. D. Landau et E. M. Lifshitz [6, 41] ont décrit une méthode formelle pour calculer le passage par effet tunnel hors des bandes d'énergie d'un spectre continu. En 1981, G. Nenciu [56] a montré un

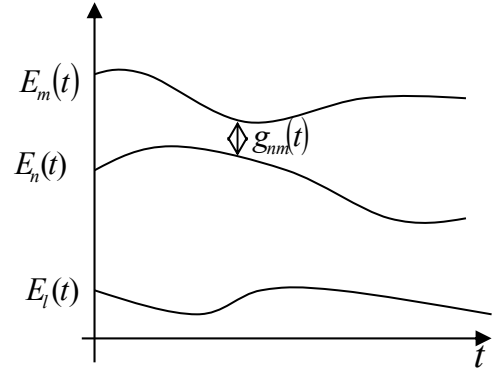


Figure 1 : La variation de la différence entre les niveaux d'énergie en fonction du temps.

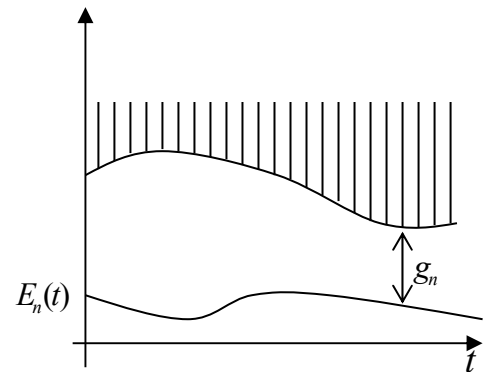


Figure 2 : Exemple d'un état discret séparé d'un continuum d'états par un gap.

théorème adiabatique pour des opérateurs auto adjoints bornés et a annoncé une généralisation aux opérateurs non bornés. Plus tard, J. E. Avron et A. Elgart [41, 52] ont montré que le théorème adiabatique est valable aussi pour les Hamiltoniens non borné et ils l'ont appliqué pour l'étude de l'effet Hall quantique.

Toutes ces généralisations dépendent de l'existence du gap dans le cas du spectre discret. Rappelons tout simplement ici que les travaux réalisés par Kato [53], Garrido [55], Nenciu [56], et Avron *et al.* [41] et qui ont suivi celui de Born et Fock [34] ont conduit à une formulation du théorème adiabatique sous l'hypothèse du gap usuel

$$g_{nm}(t) = E_m(t) - E_n(t) \quad (19)$$

entre les niveaux n et m . On peut alors affirmer que la condition générale de validité du comportement adiabatique est bien formulée comme suit : plus la quantité $\min_{0 < t < T, m} |g_{nm}(t)|$ est grande plus la probabilité de transition est faible.

En effet, la démonstration donnée par M. Born et V. Fock [34], bien que très générale, elle est encore limitée par l'hypothèse de considérer le spectre purement discret et non dégénéré de l'Hamiltonien, à l'exception de quelques situations de dégénérescence accidentelle dues aux croisements des niveaux d'énergie. Ces limitations sont assez artificielles du point de vue physique et devraient être retiré de la dérivation du théorème adiabatique faite par Kato.

2) *Le théorème adiabatique dans le cas du spectre continu :*

1. **Le théorème adiabatique sans la condition du gap**

Malgré l'existence de nombreuses publications contenant des démonstrations rigoureuses des estimations nécessaires pour justifier l'approximation adiabatique [32, 41, 52, 53, 58], des doutes ont été soulevés quant à sa validité [59-63] ce qui a conduit à une confusion à propos de la condition nécessaires à son application [40, 45, 65, 66].

Le théorème adiabatique sans la condition du gap a été montré pour la première fois en 1999 par Avron et Elgart [52] qui avaient montré que le théorème adiabatique reste valable à condition que les projections spectrales soient de rang fini indépendamment de toutes considérations spectrales. Un résultat similaire a été prouvé par Bornemann [67] pour les Hamiltoniens discrets lorsque l'ensemble des croisements des valeurs propres est de mesure nulle dans le temps. La limitation de ces approches est que, en général, aucune estimation ne

peut être faite ni sur la vitesse avec laquelle le régime adiabatique est atteint ni sur l'ordre de grandeurs de l'erreur commise [52].

La condition du gap est généralement associée à des stabilités spectrales. Par conséquent, la situation où le gap n'existe pas va conduire à des instabilités spectrales. Ainsi, il est difficile d'établir des projections spectrales régulières, ce qui est une condition nécessaire pour la validité du théorème adiabatique dans les applications pratiques. En fait, le théorème adiabatique généralisé, selon l'approche de Avron et Elgart [52], est beaucoup plus approprié pour les systèmes sans la condition du gap et qui ont une origine discrète. En fait, on dit que le gap *protège* l'état du système contre les fuites vers d'autres sous-espaces [49, 50]. Ainsi, l'existence d'un gap entre les niveaux d'énergie est une condition nécessaire pour assurer la validité de l'approximation adiabatique [3, 40, 68, 69], une exigence qui n'est pas vérifiée dans le cas d'un spectre continu.

Dans un très récent papier, D. M. Tong *et al* [40] ont montré que les conditions qualitatives du gap données par (18) sont insuffisantes pour assurer la validité du théorème adiabatique [32]. De plus, la régularité des projecteurs peut être supposée vérifiée dès le début [3]. 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 [3, 52]. Pour illustrer cette dernière affirmation on prend l'exemple d'un système quantique chargé à deux niveaux, initialement dans l'état fondamental, et qui est tourné lentement. 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 [49] a montré que le nombre de photons rayonnés qu'est de l'ordre de T^{-2} 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.

2. Le théorème adiabatique généralisé pour le spectre continu :

Dans le cadre de ce travail on va proposer une nouvelle approche du théorème adiabatique pour le cas du spectre continu. Cette approche consiste à donner une forme plus simple et pratique à 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 continu, 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 dans le paragraphe ci-dessus. Dans l'approche précédente le but était de chercher à se débarrasser de la condition du gap [69] et d'essayer de limiter son rôle en la remplaçant avec d'autres propriétés telles que : la régularité des projections spectrales, la distance à une résonance voisine dans le modèle de Dicke [50], l'échelle de temps intrinsèque dans le cas d'un état discret à la frontière d'un spectre continu [68], le nombre de photons rayonnés en électrodynamique quantique, ...etc. Alors, au lieu de faire tous ces remplacements, l'idée de ce travail est de garder la condition du gap pour le cas du spectre continu ?!!

Pour résoudre ce paradoxe on doit créer ou définir une sorte de gap, *un vrai gap*, pour le spectre continu. En effet, dans le cas du spectre continu on ne peut pas énumérer les valeurs propres et les fonctions propres car elles sont caractérisées par la valeur de la quantité physique correspondante. En plus, bien que les fonctions propres des opérateurs ayant des spectres continus ne puissent pas être normalisées de la façon habituelle comme pour les fonctions ayant des spectres discrets, on peut construire avec eux de nouvelles quantités – les différentielles propres de Weyl (paquets d'ondes) – [5, 70] qui possèdent les mêmes propriétés que possèdent les fonctions propres appartenant au spectre discret (pour plus de détails, voir [71]).

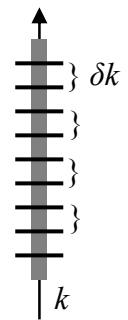


Figure 3 :
Décomposition du
spectre continu selon J.
Von Neumann [72].

Les différentielles propres sont définies par

$$|\delta\varphi(k, t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (20)$$

Elles divisent le spectre continu des valeurs propres en des régions discrètes finies mais suffisamment petites de taille δk (voir la fig. 3). La différentielle propre (20) est un paquet d'ondes spécial, qui a seulement une extension finie dans l'espace ; par conséquent, il disparaît à l'infini et peut donc être vu en analogie avec les états liés. En outre, parce qu'elles ont une extension spatiale finie, les différentielles propres peuvent être normalisées. Alors dans la limite $\delta k \rightarrow 0$, une normalisation significative des fonctions propres eux-mêmes suit : la normalisation en termes de la distribution de Dirac.

Pour δk , un petit intervalle autour de la valeur du paramètre k [ceci correspond à un groupe d'états «voisins» ; voir la fig. 3], l'opérateur

$$\delta P(k, t) = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k', t)\rangle \langle \varphi(k', t)| dk' \quad (21)$$

représente le projecteur (l'opérateur de projection différentiel [31]) sur les états contenus dans l'intervalle et caractérisés par les valeurs du paramètre k dans la marge des valeurs δk . L'action de $\delta P(k, t)$ sur une fonction $|\psi(t)\rangle$ d'onde est définie par

$$\delta P(k, t)|\psi(t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} C(k', t)|\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (22)$$

L'application de l'opérateur de projection différentiel $\delta P(k, t)$ cause ainsi la projection de la fonction d'onde sur le domaine des états $|\varphi(k, t)\rangle$, qui sont caractérisés par des valeurs k dans l'intervalle δk .

Une fois on a rappelé ces deux quantités, on peut maintenant donner l'énoncé du théorème adiabatique généralisé au cas du spectre continu.

3. L'énoncé du théorème adiabatique généralisé :

Pour simplifier, on suppose que *le spectre de H est entièrement continu* et qu'il est non dégénéré.

Par hypothèse les valeurs propres $E(k, s)$ et les projecteurs $\delta P(k, s)$ doivent vérifier les deux conditions suivantes

- Pour un intervalle $[k, k + \delta k]$, dont les conditions auxquelles δk seront données par la suite, les valeurs propres supposées continues vérifient

$$\forall s / 0 \leq s \leq 1 : E(k', s) \neq E(l, s), \quad \forall k' \in [k, k + \delta k] \text{ et } l \notin [k, k + \delta k] \quad (23)$$

Cette condition est l'analogie de la condition de non croisement (16) (voir figure 4).

- 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'éventuelles discontinuités de première espèce.

A la limite $T \rightarrow \infty$ le théorème adiabatique généralisé s'énonce comme suit :

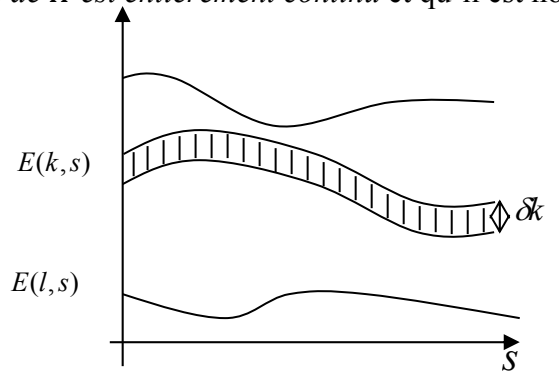


Figure 4 : Evolution d'une gamme d'énergie de largeur δk en fonction du temps.

« Sous les deux conditions ci-dessus, si le système se trouve à l'instant initial $s = 0$ dans un état appartenant à un intervalle $[k, k + \delta k]$ et si l'Hamiltonien évolue suffisamment lentement il reste à tout instant s dans le même intervalle ».

Formellement, le théorème adiabatique généralisé stipule que $U_T(s)$ possède la propriété asymptotique suivante

$$\forall k : \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) \delta P(k, 0) = \delta P(k, s) \lim_{T \rightarrow \infty} U_T(s) \quad (24)$$

4. Démonstration du théorème adiabatique généralisé¹ :

a) Représentation des axes tournants :

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 $A(s)$ donnée par

$$\delta P(k, s) = A(s) \delta P(k, 0) A^\dagger(s) \quad (25)$$

L'opérateur $A(s)$ vérifiant la condition initiale $A(0) = 1$ est donné par l'équation différentielle

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A(s) = K(s) A(s) \quad (26)$$

où $K(s)$ est un opérateur hermitien obéissant à

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k, s) = [K(s), \delta P(k, s)] \quad (27)$$

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

$$\langle \varphi(k, s) | K(s) | \varphi(k', s) \rangle = 0 \quad \text{pour } k' \in [k, k + \delta k] \quad (28)$$

cette dernière implique

$$K(s) = [1 - \delta P(k, s)] i\hbar \int |\dot{\varphi}(k, s)\rangle \langle \varphi(k, s)| dk \quad (29)$$

Dans la représentation des axes tournant, l'observable $H(s)$ se transforme en

$$H^{(A)}(s) = A^\dagger(s) H(s) A(s) = \int E(k, s) |\varphi(k, 0)\rangle \langle \varphi(k, 0)| dk \quad (30)$$

De même $K(s)$ se transforme en

¹ Pour plus de détails voir [71].

$$K^{(A)}(s) = A^+(s)K(s)A(s) \quad (31)$$

L'opérateur d'évolution de cette nouvelle « représentation » est, donc, donné par

$$U^{(A)}(s) = A^+(s)U_T(s) \quad (32)$$

vérifiant

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = [T H^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)] U^{(A)}(s) \quad (33)$$

$$U^{(A)}(0) = 1 \quad (34)$$

b) Démonstration du théorème :

Il est clair que $H^{(A)}(s)$ et $K^{(A)}(s)$ sont indépendants de T . On s'attend donc à ce que, à la limite $T \rightarrow \infty$, l'effet de $K^{(A)}(s)$ au second membre de l'équation (33) soit complètement masqué par celui de $TH^{(A)}(s)$. Désignons par $\Phi_T(s)$ la solution de l'équation de Schrödinger ainsi formée, on trouve

$$\Phi_T(s) = \int e^{\frac{-iT \int_0^s E(k,s') ds'}{\hbar}} |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k,0)| dk \quad (35)$$

Démontrer (24) est donc analogue à montrer que $U^{(A)}(s)$ tende vers $\Phi_T(s)$. Comme on va le voir, cette propriété est bien vérifiée et donne, d'après (32), le résultat suivant

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} A(s)\Phi_T(s) \quad (36)$$

Pour le montrer, on fait une nouvelle transformation unitaire en posant

$$W(s) = \Phi_T^+(s)U^{(A)}(s) = \Phi_T^+(s)A^+(s)U_T(s) \quad (37)$$

vérifiant

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^s \bar{K}(s')W(s') ds' \quad (38)$$

avec

$$\bar{K}(s) = \Phi^+(s)K^{(A)}(s)\Phi(s) \quad (39)$$

ou, d'après (31)

$$\bar{K}(s) = \Phi^+(s)A^+(s)K(s)A(s)\Phi(s) \quad (40)$$

On 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 (38) tend vers zéro lorsque $T \rightarrow \infty$ [73].

$$\bar{K}(s) = \iint \bar{K}(k, l, s) dl dk \quad (41)$$

avec

$$\bar{K}(k, l, s) = \langle \varphi(k, 0) | \bar{K}(s) | \varphi(l, 0) \rangle \langle \varphi(k, 0) | \varphi(l, 0) \rangle \quad (42)$$

ce qui donne

$$\bar{K}(k, l, s) = e^{\frac{iT}{\hbar} \int_0^s [E(k, s') - E(l, s')] ds'} K^{(A)}(k, l, s) \quad (43)$$

où

$$K^{(A)}(k, l, s) = A^+(s) \langle \varphi(k, s) | \varphi(k, s) \rangle K(s) \langle \varphi(l, s) | \varphi(l, s) \rangle A(s) \quad (44)$$

Suivant la condition (28), pour un k fixé, on remarque que $K^{(A)}(k, l, s)$ est nul pour tout $l \in [k, k + \delta k]$, donc on a le résultat important suivant

$$\forall k: \bar{K}(k, l, s) = 0 \quad / l \in [k, k + \delta k] \quad (45)$$

quant aux valeurs de $\bar{K}(k, l, s)$ telles que $l \notin [k, k + \delta k]$, elles contiennent le facteur oscillant $\exp[iT\hbar^{-1} \int_0^s (E(k, s') - E(l, s')) ds']$. 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 (23) 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 $T \rightarrow \infty$. Ainsi, en posant

$$F(s) = \int_0^s \bar{K}(s') ds' \quad (46)$$

on trouve

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar} F(s) W(s) - \frac{i}{\hbar} \int_0^s F(s') \frac{\partial W(s')}{\partial s'} ds' \quad (47)$$

$$F(k, l, s) = \int_0^s e^{\frac{iT}{\hbar} \int_0^{s'} [E(k, s'') - E(l, s'')] ds''} K^{(A)}(k, l, s') ds', \quad / l \notin [k, k + \delta k] \quad (48)$$

$K^{(A)}(k, l, s)$ est une fonction continue de S indépendant de T . Quant à l'exponentielle, il est clair [73] que sa phase n'est jamais stationnaire. En intégrant par partie, il vient d'ailleurs

$$F(k, l; s) = \frac{\hbar}{iT} \left[e^{\frac{iT \int_0^s [E(k, s') - E(l, s')] ds'}{\hbar}} \frac{K^{(A)}(k, l, s')}{E(k, s') - E(l, s')} \Big|_0^s - \int_0^s e^{\frac{iT \int_0^s [E(k, s') - E(l, s')] ds'}{\hbar}} \frac{\partial K^{(A)}(k, l, s')}{\partial s'} \frac{1}{E(k, s') - E(l, s')} ds' \right] \quad (49)$$

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 finis. Donc $F(k, l, s)$ tend asymptotiquement vers zéro comme $\frac{1}{T}$. En conclusion, lorsque $T \rightarrow \infty$, on a

$$F(s) = O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (50)$$

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*

$$[E(k, s) - E(l, s)] \gg \frac{1}{T} \quad (51)$$

A la limite $T \rightarrow \infty$, δk peut être choisi aussi petit que l'on veut. La condition (51) 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* [32].

Par conséquent, on a

$$W(s) = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right) \quad (52)$$

En se reportant à la définition de $W(s)$, on tire le résultat annoncé

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\approx} A(s) \Phi_T(s) \left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right) \right] \quad (53)$$

Comme $\Phi_T(s)$ commute avec les projecteurs $\delta P(k, 0)$ et comme l'opérateur unitaire $A(s)$ possède la propriété (25), on a

$$A(s) \Phi_T(s) \delta P(k; 0) = \delta P(k; s) A(s) \Phi_T(s) \quad (54)$$

L'expression asymptotique de $U_T(s)$ qu'on vient d'obtenir vérifie donc bien les relations (24).

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

$$U(t_f, t_0) = U_T(1) \approx A(1)\Phi_T(1) \quad (55)$$

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 $|\varphi(k_0, 0)\rangle$ le vecteur normalisé représentant l'état du système à l'instant t_0 . L'approximation adiabatique consiste à écrire

$$U(t_f, t_0)|\varphi(k_0, 0)\rangle \approx A(1)\Phi_T(1)|\varphi(k_0, 0)\rangle \quad (56)$$

Une mesure de l'erreur que comporte cette approximation est donnée par la probabilité η de trouver le système à l'instant t_f dans un état hors de l'intervalle $[k_0, k_0 + \delta k_0]$

$$\eta = \langle \varphi(k_0, 0) | U^+(t_f, t_0) A(1) \Phi(1) Q_0 \Phi^+(1) A^+(1) U^+(t_f, t_0) | \varphi(k_0, 0) \rangle \quad (57)$$

$$Q_0 = 1 - \delta P(k_0, 0) \quad (58)$$

il vient

$$\eta = \langle \varphi(k_0, 0) | W^+(1) Q_0 W(1) | \varphi(k_0, 0) \rangle \quad (59)$$

En résolvant cette équation itérativement et en ne gardant que le premier ordre, on trouve

$$\eta = \hbar^{-2} \int_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} |\langle \varphi(k_0, 0) | F(1) | \varphi(k, 0) \rangle|^2 dk \quad (60)$$

En revenant à l'échelle macroscopique t , on vérifie que le module carré de cette grandeur n'est que la densité de probabilité de trouver le système dans l'intervalle

$$[k, k + \delta k] \neq [k_0, k_0 + \delta k_0]$$

donnée par

$$\begin{aligned} \delta\wp(k_0 \rightarrow k, t) &= \left| \langle \varphi(k, t) | F(t_1) | \varphi(k_0, t_0) \rangle \right|^2 \delta k = \\ &= \left| i\hbar \int_{t_0}^{t_1} e^{i\hbar^{-1} \int_{t_0}^{t'} [E(k, t'') - E(k_0, t'')] dt''} \langle \varphi(k, t') | \dot{\varphi}(k_0, t') \rangle dt' \right|^2 \delta k \end{aligned} \quad (61)$$

L'intégrant du second membre de l'équation (61) est le produit de la fonction $\langle \varphi(k, t) | \dot{\varphi}(k_0, t) \rangle$ par une exponentielle oscillante de fréquence $E(k, t) - E(k_0, t)$. Si ces deux quantités varient dans le temps de façon suffisamment régulière, la probabilité est, au plus, de l'ordre de grandeur de la valeur maximum atteinte par le rapport de ces deux dernières dans l'intervalle $[t_0, t_f]$, c'est-à-dire

$$\delta\wp(k_0 \rightarrow k, t) \approx \max_{t \in [t_0, t_f]} \frac{|\langle \varphi(k, t) | \dot{\varphi}(k_0, t) \rangle|^2}{|E(k, t) - E(k_0, t)|} \delta k \quad (62)$$

La condition de validité de l'approximation adiabatique

$$\eta = \hbar^{-2} \int_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} \delta\wp(k_0 \rightarrow k, t) \ll 1 \quad (63)$$

implique que

$$\forall t \in [t_0, t_f]: \max_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} |\langle \varphi(k, t) | \dot{\varphi}(k_0, t) \rangle| \ll \min_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} |E(k, t) - E(k_0, t)| \quad (64)$$

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 $T \rightarrow \infty$, le deuxième membre de l'inégalité ci-dessus peut être aussi petit que l'on veut ; ainsi, on peut prendre dans la pratique

$$k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0], \forall t \in [t_0, t_f]: \langle \varphi(k, t) | \dot{\varphi}(k_0, t) \rangle \rightarrow 0 \quad (65)$$

Cette condition a été considérée très récemment avec plus de détails par V. I. Yukalov [74].

3) Solution de l'équation de Schrödinger :

On va maintenant déterminer la solution de l'équation de Schrödinger (1) pour un système ayant un spectre continu évoluant de façon adiabatique. Cette évolution s'effectue pendant la période T qui est supposée très grande pour qu'on puisse appliquer l'approximation adiabatique généralisée.

Donc on cherche la solution

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C(l, t) |\varphi(l, t)\rangle dl \quad (66)$$

avec

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi(k, t_0)\rangle \quad (67)$$

$$C(k, t_0) = \delta(l - k) \quad (68)$$

On applique l'égalité (24) sur le ket initial (67), ce qui donne

$$U(t, t_0) \delta P(k, t_0) |\varphi(k, t_0)\rangle = \delta P(k, t) U(t, t_0) |\varphi(k, t_0)\rangle \quad (69)$$

d'après la propriété (22) du projecteur $\delta P(k, t_0)$ on trouve

$$U(t, t_0) \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(k', t_0) | \varphi(k, t_0) \rangle |\varphi(k', t_0)\rangle dk' = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k', t)\rangle \langle \varphi(k', t) | U(t, t_0) |\varphi(k, t_0)\rangle dk' \quad (70)$$

Le premier membre donne

$$U(t, t_0) \int_k^{k+\delta k} \delta(k' - k) |\varphi(k', t_0)\rangle dl' = U(t, t_0) |\varphi(k', t_0)\rangle = |\psi(t)\rangle \quad (71)$$

Tandis que le deuxième membre donne en remplaçant $|\psi(t)\rangle$ par son développement (66)

$$\begin{aligned} \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k', t)\rangle \langle \varphi(k', t) | \psi(t)\rangle dk' &= \int_k^{k+\delta k} \int C(l, t) |\varphi(k', t)\rangle \langle \varphi(k', t) | \varphi(l, t)\rangle dk' dl \\ &= \int_k^{k+\delta k} \int C(l, t) \delta(k' - l) |\varphi(k', t)\rangle dk' dl \\ &= \int_k^{k+\delta k} C(k', t) |\varphi(k', t)\rangle dk' \end{aligned} \quad (72)$$

En remplaçant (71) et (72) dans (70) on trouve

$$|\psi(t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} C(k', t) |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (73)$$

Le système passe donc à l'instant t dans l'état $|\psi(t)\rangle$ appartenant à l'intervalle $[k, k + \delta k]$. Pour que cette approximation soit valable, δk doit vérifier la condition (51). Par comparaison avec (66), les coefficients $C(l, t)$ vérifient

$$\begin{cases} C(l;t) = 0, & l \notin [k, k + \delta k] \\ C(l;t) \neq 0, & l \in [k, k + \delta k] \end{cases} \quad (74)$$

La probabilité pour que le système soit dans un état à l'extérieur de l'intervalle est donnée par

$$\int_{\mathfrak{R}/[k, k + \delta k]} \delta\varphi(k;t) = \int_{\mathfrak{R}/[k, k + \delta k]} |C(l;t)|^2 \delta l \quad (75)$$

d'après (74), 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 $C(k', t)$, $k' \notin [k, k + \delta k]$; en substituant (74) dans l'équation (1) on obtient

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k', t)}{\partial t} |\varphi(k', t)\rangle dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k', t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (76)$$

Multiplions maintenant l'équation (76) par le bra de la différentielle propre (20), on trouve

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k', t)}{\partial t} \langle \delta\varphi(k, t) | \varphi(k', t)\rangle dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k', t) \langle \delta\varphi(k, t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E(k', t) \right] |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (77)$$

d'où

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k', t)}{\partial t} \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(k'', t) | \varphi(k', t)\rangle dk' dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k', t) \langle \delta\varphi(k, t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - E(k', t) \right] |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (78)$$

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k', t)}{\partial t} \int_k^{k+\delta k} \delta(k'' - k') dk' dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k', t) \langle \delta\varphi(k, t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} E(k', t) \right] |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (79)$$

ce qui donne

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k', t)}{\partial t} dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k', t) \langle \delta\varphi(k, t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} E(k', t) \right] |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (80)$$

Comme la variable quelconque k balaye tout le spectre des valeurs réelles et du fait que δk est très petit, l'égalité entre les intégrales (80) implique celle entre les intégrands, donc

$$\frac{\partial C(k', t)}{\partial t} = C(k', t) \left\{ -\frac{i}{\hbar} E(k, t) + \langle \delta\varphi(k, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k', t)\rangle \right\} \quad (81)$$

C'est une équation différentielle du premier ordre admettant la solution suivante

$$C(k', t) = C(k', t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E(k', t) dt + \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k', t)\rangle dt} \quad (82)$$

Si on prend en compte la condition initiale (68), cette dernière s'écrit

$$C(k', t) = \delta(k' - k) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E(k, t') dt' + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k, t') \rangle dt'} \quad (83)$$

L'interprétation et la discussion de ce résultat seront données en détails dans le troisième chapitre.

Chapitre II

Généralisation de la théorie des invariants pour le spectre continu

CH II - GENERALISATION DE LA THEORIE DES INVARIANTS POUR LE SPECTRE CONTINU

I. Introduction :

La théorie des invariants pour des Hamiltoniens Hermitiens a été introduite en 1969 par H. R. Lewis, JR., W. B. Riesenfeld [9], où ils ont dérivé une simple relation entre les vecteurs propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger.

La théorie des invariants représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendant du temps. Cette importance de la théorie des invariants est reliée au langage mathématique puissant qui la caractérise, et à sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Dans cette partie de notre travail, on va donner quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants telle qu'elle a été introduite par Lewis et Riesenfeld dans le cas du spectre discret (pour lequel son application a été limitée depuis sa découverte). À travers ces notions on peut, au moins, donner aux lecteurs une idée sur l'importance de la théorie des invariants pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Cette dernière sera généralisée ultérieurement pour le cas du spectre continu.

On considère la théorie des invariants pour un système quantique général dont l'opérateur Hamiltonien $H(t)$ est explicitement dépendant du temps. Bien sûr, un tel système n'est pas fermé, dans le sens où il y a des influences externes qui peuvent changer les paramètres du système, changer son énergie totale ou le moment angulaire, etc.... La théorie du rayonnement semi-classique fournit un exemple bien connu ; dans ce cas le système quantique est pris pour être un atome ou une molécule qui subit une transition radiative, et le terme explicitement dépendant du temps dans l'Hamiltonien est l'interaction avec le champ de radiation classique.

L'idée de base de la théorie des invariants est la dérivation d'une relation entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger. On peut trouver une transformation de phase dépendant du temps pour chaque état propre d'un invariant telle que la fonction propre devient une solution particulière de l'équation (1), la phase correspondante est déterminée en résolvant une simple équation différentielle du premier ordre.

II. La théorie de Lewis-Riesenfeld :

1) *Exposition de la méthode :*

L'objectif donc est de résoudre l'équation de Schrödinger (1) pour un système dont l'Hamiltonien $H(t)$ est explicitement dépendant du temps, d'après Lewis et Riesenfeld [8, 9] on peut toujours supposer l'existence d'un autre opérateur Hermitien non trivial $I(t)$, ce dernier est dit invariant s'il satisfait l'équation de Liouville-Von Neumann

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] = 0 \quad (84)$$

$$I(t) = I^+(t) \quad (85)$$

En appliquant l'équation (84) sur $|\psi(t)\rangle$ et en utilisant l'équation (1), on obtient la relation

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} |\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] |\psi\rangle = 0 \quad (86)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [I(t)|\psi\rangle] = H(t)[I(t)|\psi\rangle] \quad (87)$$

Cette dernière formule implique que l'action de l'invariant sur un vecteur d'état, solution de l'équation de Schrödinger, produit une autre solution. Ce résultat est valable pour tout invariant, même si ce dernier implique des opérations de dérivation par rapport au temps. Si l'invariant n'implique pas des dérivations par rapport au temps, alors on est capable de dériver une règle simple et explicite pour choisir les phases des fonctions propres de $I(t)$ telles que ces états eux-mêmes satisfassent l'équation de Schrödinger. Dans ce qui suit, On suppose que $I(t)$ n'implique pas des dérivations par rapport au temps.

On suppose que l'invariant $I(t)$ a un ensemble complet de fonctions propres. Soit λ_n les valeurs propres de $I(t)$ et $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ ses fonctions propres, où k représente tous les autres nombres quantiques nécessaires pour spécifier les états propres. L'équation aux valeurs propres s'écrit comme

$$I(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle = \lambda_n |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (88)$$

$$\langle \varphi_{n,k}(t) | \varphi_{n',k'}(t) \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{k,k'} \quad (89)$$

En vertu de l'équation (85), les valeurs propres λ_n sont réelles et indépendantes du temps, comme on peut le déduire facilement en dérivant l'équation (88) par rapport au temps

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle + I(t) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle = \frac{\partial \lambda_n}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle + \lambda_n \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (90)$$

On applique l'équation (84) sur l'état propre $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$, ce qui donne

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle + I(t)H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle - \lambda_n H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle = 0 \quad (91)$$

le produit scalaire de l'équation (91) par un état $\langle\varphi_{n',k'}(t)|$ est

$$i\hbar \left\langle\varphi_{n',k'}(t) \left| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle + (\lambda_{n'} - \lambda_n) \langle\varphi_{n',k'}(t)|H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle = 0 \quad (92)$$

ce qui implique

$$\left\langle\varphi_{n,k}(t) \left| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = 0 \quad (93)$$

en prenant maintenant le produit scalaire de l'équation (90) avec $\langle\varphi_{n,k}(t)|$, on obtient

$$\frac{\partial \lambda_n}{\partial t} = \left\langle\varphi_{n,k}(t) \left| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = 0 \quad (94)$$

Comme les valeurs propres sont indépendantes du temps, il est clair que les états propres doivent être dépendants du temps.

Pour trouver le rapport entre les états propres de $I(t)$ et les solutions de l'équation Schrödinger, Lewis et Riesenfeld ont écrit en premier lieu l'équation du mouvement de $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$, en commençant par l'équation (90) et en utilisant l'équation (94), ils ont abouti à

$$(\lambda_n - I(t)) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle = \frac{\partial I(t)}{\partial t} |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (95)$$

En prenant le produit scalaire avec $\langle\varphi_{n',k'}(t)|$ et en utilisant l'équation (92) pour éliminer $\left\langle\varphi_{n',k'}(t) \left| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle$ ils ont obtenu

$$i\hbar(\lambda_n - \lambda_{n'}) \left\langle\varphi_{n',k'}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = (\lambda_n - \lambda_{n'}) \langle\varphi_{n',k'}(t)|H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (96)$$

pour $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$, on trouve

$$i\hbar \left\langle\varphi_{n',k'}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = \langle\varphi_{n',k'}(t)|H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (97)$$

L'équation (96) n'implique pas

$$i\hbar \left\langle\varphi_{n,k'}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle = \langle\varphi_{n,k'}(t)|H(t)|\varphi_{n,k}(t)\rangle$$

Si l'équation (97) est valable pour $\lambda_n = \lambda_{n'}$, aussi bien que pour $\lambda_n \neq \lambda_{n'}$, alors on déduit immédiatement que $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ est une solution particulière de l'équation de Schrödinger.

Jusqu'ici, on n'a pas parlé de la phase de $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$: on peut définir un nouvel ensemble des vecteurs propres de $I(t)$ lié à l'ensemble précédent par une transformation de jauge dépendant du temps.

$$|\varphi_{n,k}(t)\rangle_\alpha = \exp[i\alpha_{n,k}(t)] |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (98)$$

où $\alpha_{n,k}(t)$ est une fonction réelle du temps arbitrairement choisie. Ces $|\varphi_{n,k}(t)\rangle_\alpha$ sont des états propres orthonormaux de $I(t)$ associés à λ_n , aussi bien que les $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$. Pour un choix approprié des phases $\alpha_{n,k}(t)$, l'équation (97) sera vérifiée pour $\lambda_n = \lambda_{n'}$ et donc l'objectif sera atteint, à condition d'avoir

$$\hbar \delta_{kk'} \frac{d\alpha_{n,k}}{dt} = \left\langle \varphi_{n,k'}(t) \left| \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle \quad (99)$$

Pour satisfaire cette équation, les états $|\varphi_{n,k}(t)\rangle$ doivent être choisies de sorte que le membre à droite s'annule pour $k' \neq k$. La diagonalisation est toujours possible car l'opérateur $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)$ est hermitien. Une fois on a choisi les états, les phases $\alpha_{n,k}(t)$ sont choisies pour qu'elles satisfassent l'équation simple

$$\hbar \frac{d\alpha_{n,k}}{dt} = \left\langle \varphi_{n,k}(t) \left| \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] \right| \varphi_{n,k}(t) \right\rangle \quad (100)$$

Du fait que chacun de ces nouveaux états propres de $I(t)$ satisfait l'équation de Schrödinger, la solution générale est donnée par

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k} e^{i\alpha_{n,k}(t)} |\varphi_{n,k}(t)\rangle \quad (101)$$

où $C_{n,k}$ sont des coefficients indépendants du temps correspondant à $|\psi(t_0)\rangle$ via

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,k} C_{n,k} e^{i\alpha_{n,k}(t_0)} |\varphi_{n,k}(t_0)\rangle \quad (102)$$

En résumé:

- L'action de l'invariant $I(t)$ sur une solution de l'équation de Schrödinger (1) donne une autre solution de cette équation.
- Cet invariant possède un spectre indépendant du temps.
- Si $I(t)$ a un spectre non-dégénéré, toutes ses fonctions propres sont aussi solutions de l'équation de Schrödinger (1) à une phase près. Et s'il a un spectre dégénéré, on peut introduire des bases adaptées à chaque sous-espace propre, dont les éléments deviennent des solutions de l'équation de Schrödinger.

2) La recherche de l'invariant :

Une fois que l'on connaît l'intérêt d'utiliser les invariants pour trouver des solutions exacte pour l'équation de Schrödinger, on peut aborder directement le problème de trouver ces invariants. En fait, trouver un invariant ne repose pas sur des méthodes rigoureuses dans le cas général ; en effet, l'idée principale de la théorie des invariants est de fournir une base de l'espace de Hilbert dont les éléments sont eux-mêmes des solutions particulières de l'équation de Schrödinger et sur la base desquelles on peut construire des solutions générales. Ainsi, il y a une infinité de candidats pour fournir une telle base ; à condition qu'ils vérifient l'équation de Liouville-Von Neumann (84) avec la condition (85). Dans la majorité des cas, on propose des opérateurs d'essai dépendant d'un certain nombre de paramètres qui seront déduit après l'insertion dans l'équation (84). Une fois l'invariant est trouvé, les résultats ci-dessus s'appliquent. Pour assurer le fait que la base obtenue est la meilleure base pour le système en question, il est généralement préférable de proposer une forme pour l'invariant qui soit proche de celle de l'Hamiltonien.

Dans le cas d'un système de dimension finie, il y a un résultat dû à [75] qui stipule qu'on peut avoir un invariant pour le système (1) si et seulement si, on peut construire une algèbre de Lie. Dans le cas de dimension infinie, pour qu'un système de la forme (1) ait un invariant, il faut que l'algèbre de Lie soit de dimension finie. Paradoxalement, plusieurs exemples d'intérêt physique (comme l'oscillateur harmonique), ont une algèbre de Lie de dimension finie (elle est même de dimension réduite). Supposons par exemple que l'algèbre de Lie engendrée par $H(t)$ est donnée par l'ensemble des opérateurs hermitiens

$$\Lambda = \{T_1, T_2, \dots, T_n\} \tag{103}$$

On essaie donc de trouver des invariants $I(t)$ qui se décomposent complètement sur cette algèbre de Lie. On prend alors $I(t)$ sous la forme:

$$I(t) = \sum_{l=1}^n \beta_l(t) T_l \tag{104}$$

En injectant cette forme dans la formule (84), on voit bien que les $\beta_l(t)$ doivent vérifier un certain système d'équations. Pour retrouver ces équations différentielles, on doit connaître la décomposition des commutateurs $[H(t), T_l]$ dans la base Λ . En faisant cela, on trouve les coefficients C_l^j

$$[H(t), T_l] = \sum_{j=1}^n C_l^j T_j \tag{105}$$

Connaissant ces coefficients, on peut donner les équations différentielles, que les $\beta_l(t)$ doivent vérifier

$$i\dot{\beta}_l(t) = \hbar \sum_{j=1}^n C_l^j \beta_j(t), \quad l \in \{1, 2, \dots, n\} \quad (106)$$

Ainsi, à chaque ensemble des $\beta_l(t)$ qui vérifient (106), est associé un invariant (104).

3) Nouvelle approche

Dans ce paragraphe, on va proposer une nouvelle approche pour décrire la théorie des invariants ci-dessus en termes de l'opérateur d'évolution et des projecteurs sur l'espace de Hilbert [24]. Cette approche va fournir une porte vers une généralisation plus simple et facile de la théorie des invariants pour le cas des spectres continus.

L'idée de base est de remplacer l'équation de Liouville-Von Neumann (84), toujours en gardant la condition (85), par l'équation suivante

$$I(t) = U(t, t_0)I(t_0)U^+(t, t_0) \quad (107)$$

en effet, en dérivant cette équation par rapport au temps

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} = \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} I(t_0)U^+(t, t_0) + U(t, t_0)I(t_0)\frac{\partial U^+(t, t_0)}{\partial t} \quad (108)$$

et en utilisant l'équation (3) et son conjuguée complexe on retrouve l'équation (84)

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H(t)U(t, t_0)I(t_0)U^+(t, t_0) - \frac{1}{i\hbar} U(t, t_0)I(t_0)U^+(t, t_0)H(t) \quad (109)$$

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H(t), I(t)]$$

Ceci dit, considérons le projecteur instantané sur l'état propre² $|\varphi_n(t)\rangle$ de l'invariant à l'instant t

$$P_n(t) = |\varphi_n(t)\rangle\langle\varphi_n(t)| \quad (110)$$

On peut montrer que ce dernier est aussi un invariant, en effet

$$i\hbar \frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial |\varphi_n(t)\rangle\langle\varphi_n(t)|}{\partial t} + i\hbar |\varphi_n(t)\rangle \frac{\partial \langle\varphi_n(t)|}{\partial t} \quad (111)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = \sum_{m \neq n} \langle\varphi_m(t)| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(t)\rangle [|\varphi_m(t)\rangle\langle\varphi_n(t)| - |\varphi_n(t)\rangle\langle\varphi_m(t)|] \quad (112)$$

où on a utilisé la relation d'orthonormalisation pour trouver

² Pour des raisons de simplicité, on suppose que le spectre est non dégénéré.

$$\langle \varphi_m(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_n(t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial \langle \varphi_n(t) |}{\partial t} | \varphi_m(t) \rangle \quad (113)$$

en utilisant les équations (90) et (91) ainsi que la propriété $\frac{\partial \lambda_n}{\partial t} = 0$ on trouve

$$\langle \varphi_m(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_n(t) \rangle = \langle \varphi_m(t) | H(t) | \varphi_n(t) \rangle + \frac{\lambda_m}{\lambda_n} \langle \varphi_m(t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi_n(t) \rangle \quad (114)$$

d'où

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial P_n(t)}{\partial t} &= \sum_m \langle \varphi_m(t) | H(t) | \varphi_n(t) \rangle [| \varphi_m(t) \rangle \langle \varphi_n(t) | - | \varphi_n(t) \rangle \langle \varphi_m(t) |] + \\ &\sum_{m \neq n} \frac{\lambda_m}{\lambda_n} \langle \varphi_m(t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi_n(t) \rangle [| \varphi_m(t) \rangle \langle \varphi_n(t) | - | \varphi_n(t) \rangle \langle \varphi_m(t) |] \end{aligned} \quad (115)$$

en utilisant maintenant la propriété (97) et l'hermiticité de l'Hamiltonien, *i.e.*

$$\langle \varphi_m(t) | H(t) | \varphi_n(t) \rangle = \langle \varphi_n(t) | H(t) | \varphi_m(t) \rangle$$

le deuxième terme de (115) s'annule et on trouve

$$i\hbar \frac{\partial P_n(t)}{\partial t} = H(t) | \varphi_n(t) \rangle \langle \varphi_n(t) | - | \varphi_n(t) \rangle \langle \varphi_n(t) | H(t) = [H(t), P_n(t)] \quad (116)$$

CQFD.

En termes de la formule (107), cette propriété importante du projecteur peut s'écrire

$$P_n(t)U(t, t_0) = U(t, t_0)P_n(t_0) \quad (117)$$

Cette équation est l'analogie exact de l'équation (17) décrivant le théorème adiabatique, ainsi on s'attend à avoir des solutions analogues! Il faut noter ici qu'il n'y a aucun lien entre les deux cas du fait que les projecteurs dans l'équation (17) projettent sur les états propres de l'Hamiltonien tandis que dans l'équation (117) on a affaire à des projections sur les états propres de l'invariant. En fait, dans la limite adiabatique où l'Hamiltonien lui-même est considéré en tant qu'invariant les deux formules coïncident.

Il reste maintenant la détermination de la solution de l'équation de Schrödinger. Pour faire, on développe la solution sur la base des vecteurs propres de l'invariant

$$| \psi(t) \rangle = \sum_m C_m(t) | \varphi_m(t) \rangle \quad (118)$$

avec

$$| \psi(t_0) \rangle = | \varphi_n(t_0) \rangle \quad (119)$$

En appliquant (117) sur la condition initiale (119) on trouve

$$P_n(t)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = U(t, t_0)P_n(t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (120)$$

$$P_n(t)|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (121)$$

$$\sum_m C_m(t)\langle\varphi_n(t)|\varphi_m(t)\rangle |\varphi_n(t)\rangle = |\psi(t)\rangle \quad (122)$$

d'où

$$|\psi(t)\rangle = C_n(t)|\varphi_n(t)\rangle \quad (123)$$

Il est clair d'après ce résultat que si la particule se trouve dans l'un des états propres de l'invariant à l'instant initial, la solution de l'équation (1) évolue de sorte qu'elle reste toujours proportionnelle au même état propre donné à l'instant t . Le coefficient $C_n(t)$ est déduit par l'insertion de (123) dans (1) ; en effet

$$i\hbar \frac{\partial C_n(t)}{\partial t} |\varphi_n(t)\rangle + i\hbar C_n(t) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_n(t)\rangle = C_n(t)H(t)|\varphi_n(t)\rangle \quad (124)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial C_n(t)}{\partial t} = -C_n(t)\langle\varphi_n(t)| \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi_n(t)\rangle \quad (125)$$

ce qui donne

$$C_n(t) = C_n(t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle\varphi_n(t')| [i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t')] |\varphi_n(t')\rangle dt'} \quad (126)$$

Ainsi, on a obtenu un résultat équivalent au résultat (101) ci-dessus obtenu dans le travail initial de Lewis et Riesenfeld [8, 9] et aux résultats obtenus dans le cadre du théorème adiabatique pour le cas discret.

III. La théorie des invariants pour le spectre continu:

1) Introduction :

Tout ce qui a été dit en ce qui concerne les propriétés d'un invariant se généralisent sans ambiguïté au cas du spectre continu, à savoir : un invariant est un opérateur satisfaisant l'équation de Liouville-Von Neumann (84) avec la condition (85), l'action de l'invariant sur un vecteur d'état solution de l'équation de Schrödinger produit une autre solution et la recherche d'un invariant se fait de la même manière que celle pour le cas discret.

Dans ce paragraphe on va essayer de généraliser naïvement le travail original de Lewis et Riesenfeld [8, 9] pour le cas où le spectre est continu, supposé non dégénéré, pour des raisons de simplicité. Soit $\lambda(k)$ les valeurs propres de $I(t)$ et $|\varphi(k, t)\rangle$ ses fonctions propres, où k est un nombre réel. L'équation aux valeurs propres s'écrit comme

$$I(t)|\varphi(k, t)\rangle = \lambda(k)|\varphi(k, t)\rangle \quad (127)$$

$$\langle\varphi(k, t)|\varphi(k', t)\rangle = \delta(k - k') \quad (128)$$

Vérifions maintenant si la propriété (85) assure toujours l'indépendance par rapport au temps des valeurs propres! Ainsi, en dérivant l'équation (127) par rapport au temps, on obtient

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} |\varphi(k, t)\rangle + I(t) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(k, t)\rangle = \frac{\partial \lambda(k)}{\partial t} |\varphi(k, t)\rangle + \lambda(k) \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(k, t)\rangle \quad (129)$$

L'équivalent de l'équation (92) est donc

$$i\hbar \left\langle \varphi(k', t) \left| \frac{\partial I(t)}{\partial t} \right| \varphi(k, t) \right\rangle + (\lambda(k') - \lambda(k)) \langle \varphi(k', t) | H(t) | \varphi(k, t) \rangle = 0 \quad (130)$$

En prenant maintenant le produit scalaire de l'équation (127) par $\langle \varphi(k', t) |$ (et non pas $\langle \varphi(k, t) |$ à cause de la propriété (128)), on obtient

$$\frac{\partial \lambda(k)}{\partial t} \delta(k - k') = \langle \varphi(k', t) | \frac{\partial I(t)}{\partial t} | \varphi(k, t) \rangle + (\lambda(k') - \lambda(k)) \langle \varphi(k', t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k, t) \rangle \quad (131)$$

ce qui donne d'après (130)

$$i\hbar \frac{\partial \lambda(k)}{\partial t} \delta(k - k') = (\lambda(k') - \lambda(k)) \langle \varphi(k', t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k, t) \rangle \quad (132)$$

Si on prend $k = k'$ le deuxième membre s'annule tandis qu'on voit l'apparition du produit

$$i\hbar \frac{\partial \lambda(k)}{\partial t} \delta(0) = 0 \quad (133)$$

ce qui implique que les valeurs propres sont indépendants du temps

$$\frac{\partial \lambda(k)}{\partial t} = 0 \quad (134)$$

Ce résultat va impliquer la propriété importante déduite de l'équation (132)

$$(\lambda(k') - \lambda(k)) \langle \varphi(k', t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k, t) \rangle = 0 \quad (135)$$

Là il faut faire attention, l'équation (135) n'est pas une équation ordinaire, en fait la quantité $\langle \varphi(k', t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k, t) \rangle$ est une distribution dont le support ne contient qu'un seul point, à savoir [76]

$$\text{Supp} \left(\langle \varphi(k', t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k, t) \rangle \right) = \{k = k'\} \quad (136)$$

Il est clair donc qu'on ne peut pas obtenir des résultats analogues à (97) ou (99) parce que, d'après la théorie de distribution [76], une telle quantité peut s'écrire sous la forme

$$\langle \varphi(k', t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k, t) \rangle = \sum_n C_n(k, k') \delta^{(n)}(k - k') \quad (137)$$

où $\delta^{(n)}(k - k')$ est la $n^{\text{ème}}$ dérivée de la fonction de Dirac et les $C_n(k, k')$ sont des fonctions complexes. Ce résultat sera illustré par l'exemple du potentiel linéaire dépendant du temps traité dans le cinquième chapitre.

2) *Discussion des travaux précédents :*

En général, le spectre de l'invariant peut être discret, continu ou les deux en même temps. La théorie de Lewis et Riesenfeld pour un spectre continu a été considérée pour la première fois par J. G. Hartley et J. R. Ray [77] où ils ont étendu la théorie de Lewis et Riesenfeld d'un système général d'Ermakov aux systèmes ayant des spectres continus comme un *ansatz* où ils ont relié la solution de l'équation de Schrödinger aux fonctions propres de l'opérateur invariant ayant un spectre continu par la formule

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta_k(t)} |\varphi(k, t)\rangle \quad (138)$$

La limitation de l'approche de Hartley-Ray est qu'elle traitait seulement une gamme limitée d'Hamiltoniens ayant tous des spectres discrets pour lesquels ils ont trouvé des invariants avec des spectres continus (par rapport à la valeur k), et qu'ils n'ont pas traité des problèmes ayant des spectres continus. En plus, ils n'ont pas donné une formule explicite pour la phase de Lewis et Riesenfeld pour les spectres continus. Plus tard, X-C. Gao *et al* [78] ont étendu la théorie des invariants de Lewis et Riesenfeld pour obtenir une formulation généralisée de la théorie des invariants en introduisant le concept des invariants de base qui possèdent, en général, des spectres continus, X-C. Gao *et al* ont trouvé des solutions de l'équation de Schrödinger (Eq. (12) de la Réf. [78]) en utilisant la technique des intégrales de chemins. Dans leur solution, les auteurs ont généralisé la phase de Lewis et Riesenfeld directement pour définir les deux phases dynamiques et géométriques qui conduisent à un résultat infini (voir Eq. (137)), comme il a été montré dans l'introduction ci-dessus. Le cas des Hamiltoniens ayant des spectres continus n'avait été traité, à notre connaissance, dans la littérature que dans le travail de I. A. Pedrosa *et al.* [79-82] et J. R. Choi [83, 84] où ils ont considéré, entre autres, le problème de l'oscillateur harmonique inversé : dans l'article de 2002 [79], I. A. Pedrosa *et al.* ont donné la phase (Eq. (36)) sans montrer comment ils l'ont trouvé? toujours en généralisant le résultat discret (Eq. (12)) naïvement. D'autre part, dans le document de 2004 [80], ils ont donné une forme explicite pour la phase généralisée (Eq. (6)) sous une forme qui est complètement fautive, parce que le membre droit est infinie tandis que le membre à gauche est finie.

Pour trouver la phase, la plupart des auteurs [77-84] substituent la solution (138) dans l'équation de Schrödinger ce qui mène au résultat suivant

$$\hbar \frac{d\theta_k(t)}{dt} |\varphi(k, t)\rangle = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) |\varphi(k, t)\rangle \quad (139)$$

On projette ensuite cette équation sur le bra $\langle \varphi(k, t)|$ ou $\langle \varphi(k', t)|$. Si on choisit le premier bra (cette procédure est clairement parallèle à celle pour le cas discret), alors on obtient

$$\hbar \frac{d\theta_k(t)}{dt} \delta(0) = \langle \varphi(k, t)| \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) |\varphi(k, t)\rangle \quad (140)$$

qui est infini (voir l'introduction ci-dessus). D'autre part, si on multiplie par le deuxième bra, on constate que la phase est proportionnelle à $\delta(k - k')$ ce qui confirme les affirmations données ci-dessus.

3) Généralisation de la théorie des invariants

En suivant la même méthode ci-dessus pour établir la généralisation du théorème adiabatique ainsi que l'analogie établie entre la nouvelle approche proposée pour décrire la théorie des invariants et le théorème adiabatique pour le cas discret, l'évolution exacte d'un système quantique dont l'Hamiltonien et l'invariant possèdent des spectres continus est donnée par

"Si le système se trouve à l'instant initiale t_0 dans l'état propre $|\varphi(k, t_0)\rangle$ de l'invariant, il reste à tout instant t dans le sous espace généré par les états propres $|\varphi(k, t)\rangle$ appartenant à un intervalle $[k, k + \delta k]$, où la longueur δk est supposée petite".

En d'autres termes, l'évolution exacte d'un système quantique ayant un spectre continu est gouvernée par la formule

$$\delta P(k, t) U(t, t_0) = U(t, t_0) \delta P(k, t_0) \quad (141)$$

qui constitue la généralisation de l'équation (117) précédente.

Pour démontrer cette affirmation, il faut et il suffit de démontrer que l'opérateur de projection différentielle $\delta P(k, t)$ est une constante du mouvement, c'est-à-dire qu'il vérifie l'équation de Liouville-Von Neumann (84), ou sa nouvelle version (107). En effet, en dérivant l'équation (21) on trouve

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k, t)}{\partial t} = i\hbar \int_k^{k+\delta k} \left[\frac{\partial |\varphi(k', t)\rangle}{\partial t} \langle \varphi(k', t)| + |\varphi(k', t)\rangle \frac{\partial \langle \varphi(k', t)|}{\partial t} \right] dk' \quad (142)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k,t)}{\partial t} = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} \left[\langle \varphi(l,t) | \frac{\partial |\varphi(k',t)\rangle}{\partial t} | \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(k',t) | + \frac{\partial \langle \varphi(k',t) |}{\partial t} | \varphi(l,t) \rangle | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(l,t) | \right] dk' dl \quad (143)$$

en a utilisant la relation d'orthonormalisation (128) on trouve

$$\langle \varphi(l,t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k,t) \rangle = -i\hbar \frac{\partial \langle \varphi(k,t) |}{\partial t} | \varphi(l,t) \rangle \quad (144)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(l,t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k',t) \rangle [| \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(k',t) | - | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(l,t) |] dk' dl \quad (145)$$

en utilisant l'équation (135) on a

$$\langle \varphi(l,t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k',t) \rangle = \langle \varphi(l,t) | H(t) | \varphi(k',t) \rangle + \frac{\lambda(l)}{\lambda(k')} \langle \varphi(l,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k',t) \rangle \quad (146)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k,t)}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(l,t) | H(t) | \varphi(k',t) \rangle [| \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(k',t) | - | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(l,t) |] dk' dl + \quad (147)$$

en utilisant maintenant l'hermiticité de l'Hamiltonien, *i.e.*

$$\langle \varphi(l,t) | H(t) | \varphi(k',t) \rangle = \langle \varphi(k',t) | H(t) | \varphi(l,t) \rangle \quad (148)$$

on obtient

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k,t)}{\partial t} = \int_k^{k+\delta k} \int_{-\infty}^{\infty} | \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(l,t) | H(t) | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(k',t) | dk' - \int_k^{k+\delta k} | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(k',t) | H(t) \int_{-\infty}^{\infty} | \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(l,t) | dl dk' + \int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} \frac{\lambda(l)}{\lambda(k')} \langle \varphi(l,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k',t) \rangle [| \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(k',t) | - | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(l,t) |] dk' dl \quad (149)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k,t)}{\partial t} = H(t) \delta P(k,t) - \delta P(k,t) H(t) + \int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} \frac{\lambda(l)}{\lambda(k')} \langle \varphi(l,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k',t) \rangle [| \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(k',t) | - | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(l,t) |] dk' dl \quad (150)$$

Dans le dernier terme, on remarque la présence du produit

$$\langle \varphi(l,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k',t) \rangle [| \varphi(l,t) \rangle \langle \varphi(k',t) | - | \varphi(k',t) \rangle \langle \varphi(l,t) |]$$

qui est identiquement nul du fait que le support de la distribution $\langle \varphi(l, t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] | \varphi(k', t) \rangle$ est égale à l'ensemble $\{l = k'\}$, donc le dernier terme de (150) est identiquement nul³, d'où

$$i\hbar \frac{\partial \delta P(k, t)}{\partial t} = [H(t), \delta P(k, t)] \quad (151)$$

CQFD.

Passons maintenant à la démonstration de l'énoncé décrivant l'évolution d'un système dépendant du temps et ayant un spectre continu. On développe la solution de l'équation de Schrödinger (1) sur la base des vecteurs propres de l'invariant

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C(l, t) |\varphi(l, t)\rangle dl \quad (152)$$

avec

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi(k, t_0)\rangle \quad (153)$$

appliquons (141) sur la condition initiale (153)

$$\delta P(k, t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = U(t, t_0) \delta P(k, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (154)$$

$$\delta P(k, t) |\psi(t)\rangle = U(t, t_0) \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k', t_0)\rangle \langle \varphi(k', t_0) | \varphi(k, t_0) \rangle dk' \quad (155)$$

$$\delta P(k, t) \int_{-\infty}^{\infty} C(l, t) |\varphi(l, t)\rangle dl = U(t, t_0) \int_k^{k+\delta k} \delta(k - k') |\varphi(k', t_0)\rangle dk' \quad (156)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} C(l, t) |\varphi(k', t)\rangle \langle \varphi(k', t) | \varphi(l, t) \rangle dk' dl = U(t, t_0) |\varphi(k, t_0)\rangle \quad (157)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_k^{k+\delta k} C(l, t) \delta(l - k') |\varphi(k', t)\rangle dk' dl = |\psi(t)\rangle \quad (158)$$

ce qui donne finalement

$$|\psi(t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} C(k', t) |\varphi(k', t)\rangle dk' \quad (159)$$

Ainsi, on vient de démontrer que si le système vérifie la condition initiale (153), son état reste dans un intervalle $[k, k + \delta k]$ à tout instant t .

CQFD.

Il reste maintenant la détermination des coefficients $C(k', t)$, pour faire, on insert la solution (159) dans l'équation de Schrödinger (1), ce qui donne

³ Ce résultat est mathématiquement vrai car les deux bornes d'intégration sont déterminées.

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k',t)}{\partial t} |\varphi(k',t)\rangle dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k',t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k',t)\rangle dk' \quad (160)$$

Multiplions maintenant l'équation (160) par le bra de la différentielle propre (20), on trouve

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k',t)}{\partial t} \langle \delta\varphi(k,t) | \varphi(k',t)\rangle dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k',t) \langle \delta\varphi(k,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k',t)\rangle dk' \quad (161)$$

d'où

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k',t)}{\partial t} \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(k'',t) | \varphi(k',t)\rangle dk' dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k',t) \langle \delta\varphi(k,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k',t)\rangle dk' \quad (162)$$

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k',t)}{\partial t} \int_k^{k+\delta k} \delta(k'' - k') dk' dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k',t) \langle \delta\varphi(k,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k',t)\rangle dk' \quad (163)$$

ce qui donne

$$\int_k^{k+\delta k} \frac{\partial C(k',t)}{\partial t} dk' = \frac{i}{\hbar} \int_k^{k+\delta k} C(k',t) \langle \delta\varphi(k,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k',t)\rangle dk' \quad (164)$$

Comme la variable quelconque k balaye tout le spectre des valeurs réelles et du fait que δk est très petit, l'égalité entre les intégrales (164) implique celle entre les intégrands, donc

$$\frac{\partial C(k,t)}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} C(k,t) \langle \delta\varphi(k,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k,t)\rangle \quad (165)$$

C'est une équation différentielle du premier ordre admettant la solution suivante

$$C(k',t) = C(k',t_0) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k,t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] |\varphi(k',t')\rangle dt'} \quad (166)$$

qui s'écrit, si on prend en compte la condition initiale (153)

$$C(k',t) = \delta(k' - k) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k,t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] |\varphi(k',t')\rangle dt'} \quad (167)$$

Ce dernier résultat est la généralisation de l'équation (126) obtenu dans le travail initial de Lewis et Riesenfeld [8, 9] pour le cas où le spectre est continu. On a aussi obtenu une phase analogue à celle de Lewis et Riesenfeld en termes des différentielles propres. Le symbole d'intégration qui apparait implicitement dans la définition des différentielles propres (20) va permettre de se débarrasser de la fonction de Dirac ainsi que ses dérivées présentées par la formule (136) ce qui donne le résultat fini suivant (voir aussi le problème d'une particule soumise à un potentiel linéaire dans le cinquième chapitre)

$$\langle \delta\varphi(k,t) | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right] |\varphi(k,t)\rangle = \sum_n \int C_n(k,k') \delta^{(n)}(k - k') dk' = \sum_n \frac{\partial^n C_n(k,k')}{\partial k^n} \Big|_{k=k'} \quad (168)$$

En plus, on peut remarquer la grande ressemblance entre le résultat (167) et celui obtenu dans le cadre de l'approximation adiabatique, équation (83), mais la différence entre les deux est fondamentale du fait que dans l'équation (83) on travaille dans la base des états propres de l'Hamiltonien, tandis qu'ici on est dans la base des états propres de l'invariant. Le prochain chapitre est consacré pour la discussion de ces deux résultats.

Chapitre III

La phase géométrique généralisée

CH III - LA PHASE GEOMETRIQUE GENERALISEE

I. Introduction

D'après les résultats obtenus ci-dessus, le système, préparé initialement dans un état propre (de l'Hamiltonien pour le cas adiabatique et de l'invariant dans le cas exacte), 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 condition⁴ (51) autour de cet état si le spectre est continu.

Ce chapitre sera consacré à l'étude de ce facteur de phase dans les deux cas ainsi que sa relation avec la fameuse phase géométrique de Berry [11].

II. Le cas adiabatique :

1) *La phase de Berry dans le cas discret :*

En généralisant les résultats de Born et Fock obtenus pour les systèmes adiabatiques à la limite $T \rightarrow \infty$ [34], M. V. Berry, dans un papier très célèbre [11] a fait l'une des plus importantes découvertes de la mécanique quantique pour les systèmes dépendant du temps. En fait, le phénomène a été découvert pour la première fois en 1956 par S. Pancharatnam [10] dans son étude de l'interférence de la lumière classique dans les états de polarisation distincts, et redécouvert en 1984 par M. V. Berry. Berry c'est intéressé au cas où le système quantique dépendant du temps à travers un ensemble de paramètres $\{X_i(t), i = 1, 2, \dots\}$ revient à son état initial après une période T , c'est-à-dire

$$H(X_i(t_f = t_0 + T)) = H(X_i(t_0)) \quad (169)$$

la période T est supposée très grande pour qu'on puisse appliquer l'approximation adiabatique. Cette propriété (169) est équivalente à dire que le système effectue une évolution le long d'une courbe fermée C dans l'espace des paramètres $\{X_i(t), i = 1, 2, \dots\}$ définie par

$$X_i(t_f) = X_i(t_0), \quad i = 1, 2, \dots \quad (170)$$

Berry a montré qu'en plus de la phase dynamique due à l'évolution du système dans la représentation des axes tournant, le système acquiert également une nouvelle phase dont on

⁴ Dans le cas adiabatique, sinon, une telle condition n'est pas exigée.

peut attribuer au mouvement de rotation [11, 13, 36, 43, 44, 85, 86] ; 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

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_n(t_0)\rangle \quad (171)$$

Berry a montré qu'à l'instant t la solution de l'équation de Schrödinger est

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi_n(t) + \gamma_n^G(t)]\right\} |\varphi_n(t)\rangle \quad (172)$$

où

$$\phi_n(t) = \int_{t_0}^t E_n(t') dt' \quad (173)$$

n'est autre que la phase dynamique, tandis que

$$\gamma_n^G(t) = \int_{t_0}^t \left\langle \varphi_n(t') \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \right| \varphi_n(t') \right\rangle dt' \quad (174)$$

Cette phase supplémentaire est connue sous le nom de *la phase de Berry*. Après une période T le système revient à son état initial d'après (169), d'où

$$|\psi(t_f)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[-\phi_n(t_f) + \gamma_n^G(t_f)]} |\varphi_n(t_f)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}[-\phi_n(t_f) + \gamma_n^G(t_f)]} |\varphi_n(t_0)\rangle \quad (175)$$

2) *Interprétation de La phase de Berry :*

Berry a montré que la phase $\gamma_n^G(t_f)$ ne s'annule pas bien que le système revienne à son état initial [87]. En plus, elle ne dépend que de la surface engendrée par la courbe C [11, 36], autrement dit, de la *géométrie* de cette dernière [44] 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 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* [13, 43, 88] et est interprétée topologiquement comme étant la courbure d'une connexion dans l'espace des vecteurs d'unité [13, 36, 89, 90]. Si on considère l'espace des états normalisés comme un faisceau de fibres dans l'espace des rayons⁵, alors ce faisceau a une connexion normale. Cette connexion permet une comparaison des phases des états sur deux rayons voisins. La phase de Berry est alors une conséquence de la courbure de cette connexion.

⁵ Un rayon est défini comme une classe d'équivalence des états qui ne diffèrent les uns des autres que par un facteur de phase.

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 5), l'aire est à l'angle solide avec lequel la courbe C est vue à partir du centre de la sphère [11, 92]. En particulier, Berry a décrit la phase géométrique pour les particules avec spin : le cas 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 [92], Voir l'application « l'équation de Dirac dans un champ électromagnétique » dans le cinquième chapitre ci-dessous.

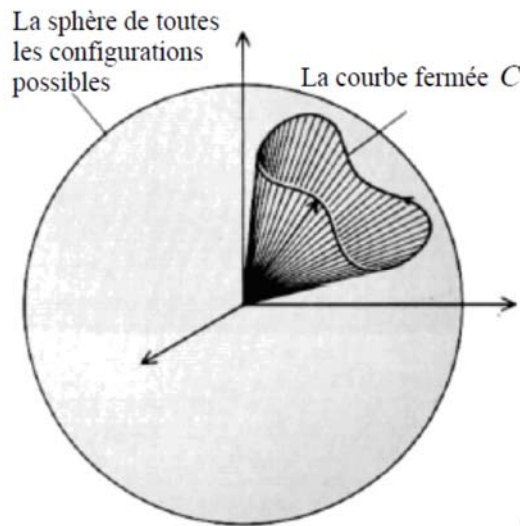


Figure 5 : L'angle solide enfermé par la courbe [91].

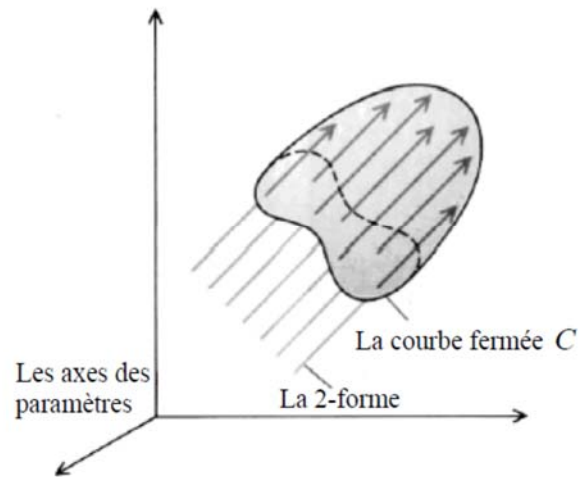


Figure 6 : Le flux d'une 2-forme à travers une surface enfermée par une courbe [91].

La phase géométrique peut être généralisée facilement aux espaces des paramètres ayant plus de trois dimensions si elle est exprimée en termes de quantités mathématiques appelées 2-forme. Une 2-forme peut être considérée en tant qu'un flux, ou un écoulement, d'une grandeur par l'espace (figure 6). La phase géométrique peut alors être calculée par l'intégration de la 2-forme sur n'importe quelle surface enfermée par le circuit [92].

De plus, B. Simon [12] a donné une interprétation géométrique à la phase de Berry en terme d'*holonomie* [11, 12, 36, 85, 87] ; en effet, l'évolution adiabatique du système le long de la courbe fermée C est analogue à un transport parallèle du vecteur d'état le long de la courbe. Après une période, 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 la courbe fermée représente la phase de Berry en question [92]. Un phénomène analogue est rencontré en mécanique classique ; le pendule de Foucault [28], et en optique : la phase de Pancharatnam [10, 93, 94].

D'après Berry [11], 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 le chemin qu'il a suivi : c'est l'origine de la phase géométrique de Berry.

L'acquisition d'une phase géométrique dans une évolution adiabatique n'est pas confinée aux phénomènes quantiques, en effet, J. H. Hannay [95] a montré que l'analogue classique de la phase de Berry existe [55, 85, 87, 96-99]. Cette dernière, notée $\Delta\theta^G(t)$, est souvent connue sous le nom de *l'angle de Hannay*. Pour les systèmes intégrables⁶, l'angle de Hannay n'est qu'un décalage supplémentaire pris par les variables d'angle du système classique quand les paramètres de ce dernier subissent une modification adiabatique le long d'un circuit fermé dans l'espace de paramètre [85]. Dans un autre papier, Berry et Hannay ont établi une relation semi-classique entre la phase de Berry et l'angle de Hannay, soit [87]

$$\Delta\theta^G(t) = -\frac{\partial\gamma_k^G(t)}{\partial k} \quad (176)$$

3) *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 expérimental [100] ce qui montre que cette dernière n'est pas une phase ordinaire [3, 48, 87, 88, 98, 101, 102]. En fait, il est connu que la dynamique des systèmes quantiques ne dépend que du module carré de la fonction d'onde quel que soit la phase attribuée à cette dernière, ce qui laisse l'impression que la phase de Berry ne peut pas être mesurée expérimentalement, ce qui n'est pas le cas [11, 28]. 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 on recombine les deux parties, avec un mécanisme approprié, ce qui donne une image d'interférence qui permet de mesurer cette phase [13, 28, 88]. Parmi ces expériences d'interférence, on a [13, 89, 105], par exemple, celles effectuées par des neutrons dans des champs magnétiques hélicoïdaux [103]

⁶ Là où il est possible d'écrire l'Hamiltonien du système en termes des variables d'action et d'angle [86].

ou avec des photons polarisés dans des fibres optiques tordues [104]. Elle est aussi observée dans les expériences de résonance quadripolaire nucléaire (RQN), voir la figure 7 [44].

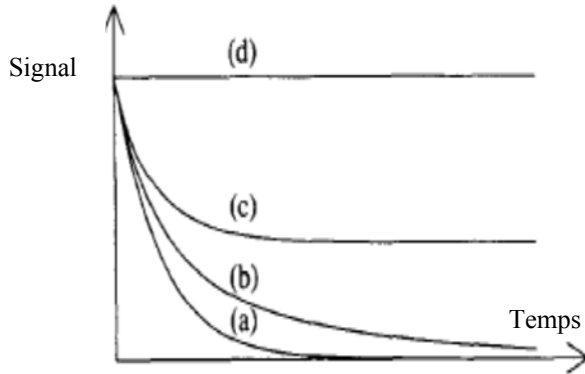


Figure 7 : Le Déphasage de Berry dû à la diffusion des atomes de Xénon [44].

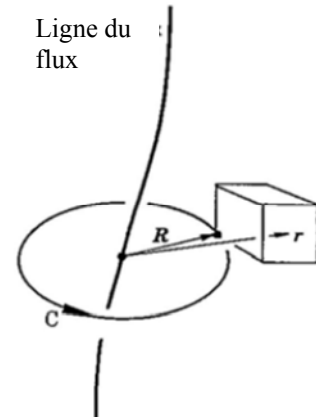


Figure 8 : L'effet Aharonov-Bohm dans une boîte transportée autour d'une ligne de Flux.

La phase de Berry a de nombreuses applications [42, 90]. Elles s'étendent de l'effet Hall quantique [3, 41], l'effet Aharonov-Bohm (fig. 8) [14-17, 38, 94, 97], l'effet Young-Taylor [90] et l'effet Güoy [102, 106] – qui ne peuvent être expliquées qu'en terme de la phase de Berry – jusqu'à la compréhension de l'atténuation des excitations collectives dans les systèmes finis de Fermi [42], ainsi qu'aux transitions de phase quantique qui se trouvent en dehors du modèle habituel de Landau-Ginzburg-Wilson [48, 107]. 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 [39, 42, 48, 101].

4) La phase de Berry pour le spectre continu :

Depuis sa découverte en 1983 [11], tous les travaux sur la phase de Berry ont resté confinés aux cas des spectres discrets. 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. I.). De plus, on vérifie que la généralisation directe de la forme (174) au spectre continu donne une quantité infinie. En effet, en substituant directement la solution

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma(t)}|\varphi(k,t)\rangle \quad (177)$$

dans l'équation de Schrödinger et en appliquant le bra $\langle\varphi(k',t)|$ on trouve

$$\langle\varphi(k',t)|i\frac{\partial}{\partial t}|\varphi(k,t)\rangle = \left(E(k,t) + \frac{\partial\gamma(t)}{\partial t}\right)\delta(k'-k) \quad (178)$$

D'après la définition de la fonction de Dirac, on voit que lorsqu'on a $k=k'$, la quantité $\langle \varphi(k', t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k, t) \rangle$ devient infinie. En fait, le résultat ci-dessus implique que cette quantité est une distribution dont le support ne contient qu'un seul point, à savoir $k=k'$. D'après la théorie de distribution [76], une telle quantité peut s'écrire sous la forme suivante (voir Eq. (137))

$$\langle \varphi(k'; t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k, t) \rangle = \sum_n C_n(k, k') \delta^{(n)}(k'-k) \quad (179)$$

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 [19] où il a pu donner un aspect géométrique à la matrice S de diffusion. Deux ans plus tard, Z. Tang et D. Finkelstein ont appliqué les résultats de Berry au cas d'un spectre d'énergie continu correspondant à certains cas des théories de jauge [108]. Un mois plus tard, G. Ghosh [20] a publié un travail qui renforce l'idée de R. G. Newton mais pour des cas particuliers de diffusion⁷. Néanmoins, ces travaux ne peuvent pas être considérés comme de vraies généralisations de la phase de Berry mais de simples extensions des résultats obtenus 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.

D'après les résultats du premier chapitre de ce travail, où on a appliqué la version *généralisée* du théorème adiabatique on va donner une généralisation de la phase de Berry pour le cas du spectre continu.

Considérons un système quantique subissant une évolution adiabatique le long d'un circuit fermé C défini par le système des équations (170), comme pour le cas discret. Par analogie avec les résultats obtenus par Berry, la solution décrite par (73) et (83) de l'équation de Schrödinger peut s'écrire

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \left[-\phi(k, t) + \gamma^G(k, t)\right]\right\} |\varphi(k, t)\rangle \quad (180)$$

où

$$\phi(k, t) = \int_{t_0}^t E(k, t') dt' \quad (181)$$

⁷ Les travaux de R. G. Newton et G. Ghosh seront considérés avec plus de détails dans le prochain chapitre.

n'est que la phase dynamique habituelle et

$$\gamma^G(k, t) = \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k, t') \rangle dt' \quad (182)$$

Ce résultat constitue la généralisation de la phase de Berry (174) pour le cas du spectre continu. D'après (179), 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, et on obtient

$$|\psi(t_f)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} [-\phi(k, t_f) + \gamma^G(k, t_f)]} |\varphi(k, t_0)\rangle \quad (183)$$

avec

$$\gamma^G(k, t_f) = \gamma^G(k, C) = \oint_C \langle \delta\varphi(k, \vec{X}) | i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{X}} | \varphi(k, \vec{X}) \rangle d\vec{X} \quad (184)$$

\vec{X} représente un vecteur de l'espace des paramètres défini par

$$\vec{X} = (X_1, X_2, X_3, \dots) \quad (185)$$

et $\vec{\nabla}_{\vec{X}}$ l'opérateur gradient suivant les axes de l'espace des paramètres défini par

$$\vec{\nabla}_{\vec{X}} = \left(\frac{\partial}{\partial X_1}, \frac{\partial}{\partial X_2}, \frac{\partial}{\partial X_3}, \dots \right) \quad (186)$$

En appliquant le théorème de Stokes [11], on obtient

$$\gamma^G(k, C) = \iint_S \vec{\nabla}_{\vec{X}} \wedge \langle \delta\varphi(k, \vec{X}) | i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{X}} | \varphi(k, \vec{X}) \rangle d\vec{S} \quad (187)$$

avec S la surface engendrée par la courbe fermée C , et comme cette dernière n'est pas nulle, la phase $\gamma^G(k, C)$ est différente de zéro, ou plus exactement de $\gamma^G(k, t_0)$, d'où le caractère géométrique de celle-ci. En effet, d'après (187) 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. Pour les particules ayant un spin S , on montre que cette phase représente le produit du spin avec l'angle solide enfermé par le circuit 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. Cette analogie entre les deux phases permet de mesurer $\gamma^G(k, t)$ expérimentalement au même titre que la phase de Berry ; en 2011, H. D. Liu et X. X. Yi [109] ont proposé une expérience pour explorer la phase géométrique dans les processus de diffusion. De plus, d'après les résultats de Z. Tang et D. Finkelstein [108], 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 [110]. En plus, on va voir que cette phase généralisée (182) 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, sont proportionnels aux différentes phases géométriques correspondant aux différentes valeurs de l'indice continu.

III. Le cas non-adiabatique :

1) Introduction :

En plus de l'intérêt expérimental dont la phase de Berry a connu, cette dernière a incité une multitude d'activité sur le plan théorique qui ont conduit à de différentes généralisations [2, 43]. 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*. Parmi ces généralisations on cite

1. 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. Ce résultat a été généralisé par J. Samuel, R. Bhandari [111] pour le cas d'une évolution non cyclique et non unitaire [2, 43, 85]. Cette généralisation s'étend aux cas classiques [85] et entre dans différentes applications physiques [2].

2. Systèmes non hermitiens :

La majorité des études sur la phase de Berry ont été consacrées aux systèmes hermitien, mais il est montré [112-115] aussi que les systèmes non hermitien ou dissipatives admettent aussi une phase analogue, la seule différence est que cette dernière est complexe [88] tandis que la phase de Berry est réelle [11].

3. Autres généralisations :

D'autre part, la phase géométrique a été généralisée pour les cas dégénérés [11, 44], les systèmes non linéaires [116], le cas d'une *mesure incomplète*, par opposition à une mesure complète d'un ensemble complet d'observable qui commutent (ECO) qui projette l'état dans un sous espace unidimensionnel de cet ensemble [105] et à des phases qui sont des invariants de jauge [44, 97, 102] introduites par Bargmann [117].

2) La phase géométrique de Aharonov-Anandan :

En 1987, Y. Aharonov et J. Anandan [13] ont montré que l'existence d'une phase géométrique ne se restreint pas aux systèmes adiabatiques [2, 29, 43, 44, 85, 87, 88, 97, 107, 118], 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 [98, 107]. Cette phase généralisée tend exactement à la phase de Berry dans la limite adiabatique [13]. A l'inverse de la phase de Berry, la phase géométrique obtenue dans le cas général est un invariant de jauge [13, 107]. La découverte de cette phase a permis de prolonger le champ d'application de la phase de Berry [13, 98, 118] 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 [14] devrait émerger de la phase de Berry quoique l'effet de Aharonov-Bohm soit indépendant de l'approximation adiabatique [13] ? Cette même généralisation pour les systèmes non-adiabatiques a été étendue à l'angle de Hannay dans le cas classique [51, 85, 87, 97, 98]. L'idée principale dans le travail de Aharonov-Anandan est leur identification de l'intégrale de la valeur moyenne de l'Hamiltonien $\hbar^{-1} \int_0^T \langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle dt$ comme une phase dynamique. Une fois que cette phase dynamique est retirée de la phase totale, l'évolution de la phase du système est de nouveau déterminée par la connexion normale et on récupère la phase de Berry pour n'importe quelle évolution cyclique du système quantique.

Dans toute description quantique de n'importe quel système physique, on a un espace de Hilbert \mathcal{H} dont les vecteurs non nuls représentent des états du système. Tout vecteur $|\psi(t)\rangle$ dans \mathcal{H} ainsi que ses multiples par un nombre complexe (i.e. $c|\psi(t)\rangle$) représentent le même état dans l'espace de Hilbert. Cet arbitraire dans la représentation des états peut être réduit en imposant la condition de normalisation

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 \tag{188}$$

Mais il reste encore un arbitraire dû aux facteurs de phase car un état normalisé $|\psi(t)\rangle$ et un vecteur $\alpha|\psi(t)\rangle$ représentent le même état dans l'espace de Hilbert à condition que le module de α soit égal à l'unité ($\|\alpha\| = 1$). L'ensemble de tous les vecteurs $\alpha|\psi(t)\rangle$, où α prend toutes les valeurs complexes possibles de modules unitaire, s'appelle un rayon unitaire et est noté $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ [119]. Ainsi, les rayons représentent des vecteurs sans aucun arbitraire de phase.

Pour comprendre la phase géométrique de Aharonov-Anandan on commence par une situation simple dans laquelle un vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ évolue cycliquement dans l'espace de Hilbert et revient au même vecteur d'état après une période T avec une différence de phase qui peut être écrite

$$|\psi(T)\rangle = \exp(i\phi) |\psi(0)\rangle \quad (189)$$

La phase totale ϕ contient deux parties : la première partie est la phase dynamique tandis que la deuxième est la phase géométrique. On va s'intéresser de la dernière phase qui peut être trouvé en soustrayant la partie dynamique de la phase totale.

L'évolution cyclique du vecteur d'état peut être décrite par une courbe C dans \mathcal{H} car $|\psi(t)\rangle$ et $\alpha|\psi(t)\rangle$ représentent deux points différents dans \mathcal{H} . Comme il y a une infinité des valeurs de α donc il y a une infinité de courbe C dans \mathcal{H} qui puissent décrire la même évolution cyclique. Dans l'espace projectif de Hilbert P des rayons, tous ces points sont représentés par le même rayon. Ainsi on va obtenir une seule courbe fermée \tilde{C} dans l'espace des rayons P correspondant au nombre infini des courbes dans l'espace usuel de Hilbert. Comme il n'y a aucun arbitraire de phase dans P on doit avoir dans l'intervalle $[0, T]$

$$|\tilde{\psi}(T)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle \quad (190)$$

Aharonov et Anandan [13] ont exploité cette propriété pour démontrer l'existence de la phase géométrique pour toute évolution cyclique. Ils ont commencé par supposer que l'état normalisé $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ évolue suivant l'équation de Schrödinger (1). On peut toujours définir un vecteur d'état $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ (équivalent à $|\psi(t)\rangle$) dans P par

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{-if(t)} |\psi(t)\rangle \quad (191)$$

En substituant (189) et (191) dans (190) on obtient

$$f(T) - f(0) = \phi \quad (192)$$

Si on suppose que la fonction d'onde totale tourne par 2π radian pour cette période T , ce qui résulte dans un mouvement cyclique pour n'importe quel vecteur d'état dans l'espace de Hilbert, donc on doit avoir une autre condition

$$f(T) - f(0) = 2\pi \quad (193)$$

La simple satisfaction de la condition (193) assure l'unicité de la fonction d'onde dans l'espace de Hilbert habituel. De plus, on obtient de (1) et (191)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [e^{if(t)} |\tilde{\psi}(t)\rangle] = H|\psi(t)\rangle \quad (194)$$

$$-\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} e^{if(t)} |\tilde{\psi}(t)\rangle + i\hbar e^{if(t)} \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (195)$$

et comme $|\psi(t)\rangle$ est normalisée, on trouve

$$-\hbar \frac{df(t)}{dt} = \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle - \langle \tilde{\psi}(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \tilde{\psi}(t) \rangle \quad (196)$$

En intégrant cette équation et en utilisant (192) on trouve

$$\phi = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle dt + \int_0^T \langle \tilde{\psi}(t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \tilde{\psi}(t) \rangle dt = \gamma + \beta \quad (197)$$

où

$$\gamma = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \psi(t) | H | \psi(t) \rangle dt \quad (198)$$

est proportionnelle à l'intégral de la valeur moyenne de l'Hamiltonien, autrement dit, la phase dynamique. Si on soustrait la partie dynamique γ de la phase totale ϕ on obtient donc la phase géométrique de Aharonov-Anandan

$$\beta = \int_0^T \langle \tilde{\psi}(t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \tilde{\psi}(t) \rangle dt \quad (199)$$

Il est clair que les mêmes $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ peuvent être choisis pour une infinité de courbes possibles par un choix approprié de $f(t)$. Cette phase est géométrique dans le sens qu'elle ne dépend pas de l'Hamiltonien responsable de l'évolution. En plus, elle est indépendante de la paramétrisation et la redéfinition de phase de $|\psi(t)\rangle$. Ainsi, β ne dépend que de l'évolution de la projection de $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace projectif de Hilbert P : dans une évolution cyclique, la fonction d'onde d'un système quantique maintient une mémoire de son mouvement sous forme de facteur de phase géométrique [13, 120-123].

3) *La phase géométrique de Aharonov-Anandan pour le spectre continu :*

Dans le travail de Aharonov-Anandan le problème de la nature du spectre n'a pas été posé explicitement ; en effet, les états cycliques peuvent être des états quelconques de l'espace de Hilbert vérifiant la condition (188). Si on plus de la condition (188) on choisit des états cycliques qui sont des états propres d'un certain opérateur donné, les résultats concernant la phase vont dépendre de la nature du spectre. En effet, dans le cas du spectre discret les résultats du paragraphe précédent restent les mêmes et ne posent aucun problème. Par contre, s'il s'agit d'un spectre continu, on doit utiliser des différentielles propres au lieu des fonctions propres (voir CH I et CH II). Ainsi, pour des fonctions propres $|\psi(k, t)\rangle$ vérifiant la condition

$$\langle \psi(k, t) | \psi(k', t) \rangle = \delta(k - k') \quad (200)$$

on définit le vecteur d'état

$$|\tilde{\psi}(k, t)\rangle = e^{-if(t)} |\psi(k, t)\rangle \quad (201)$$

où la fonction $f(t)$ vérifie (192). De plus, en suivant les mêmes étapes précédentes on obtient

$$-\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} e^{if(t)} |\tilde{\psi}(k, t)\rangle + i\hbar e^{if(t)} \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(k, t)\rangle = H |\psi(k, t)\rangle \quad (202)$$

En multipliant maintenant par la différentielle propre normalisée $\langle \delta\tilde{\psi}(k, t) |$, on trouve

$$-\hbar \frac{df(t)}{dt} = \langle \delta\psi(k, t) | H | \psi(k, t) \rangle - \left\langle \delta\tilde{\psi}(k, t) \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right| \tilde{\psi}(k, t) \right\rangle \quad (203)$$

En intégrant cette équation et en utilisant (192) on trouve

$$\phi = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \delta\psi(k, t) | H | \psi(k, t) \rangle dt + \int_0^T \left\langle \delta\tilde{\psi}(k, t) \left| i \frac{\partial}{\partial t} \right| \tilde{\psi}(k, t) \right\rangle dt = \gamma + \beta \quad (204)$$

où

$$\gamma = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle \delta\psi(k, t) | H | \psi(k, t) \rangle dt \quad (205)$$

Représente la phase dynamique. De la même manière, si on soustrait la partie dynamique γ de la phase totale ϕ on obtient donc la phase géométrique de Aharonov-Anandan

$$\beta = \int_0^T \left\langle \delta\tilde{\psi}(k, t) \left| i \frac{\partial}{\partial t} \right| \tilde{\psi}(k, t) \right\rangle dt \quad (206)$$

4) *Lien entre la phase géométrique de Aharonov-Anandan et la théorie des invariants :*

Bien qu'elle donne des solutions exactes, la théorie des invariants ne fournit pas la phase géométrique dans le cas général. Dans ce paragraphe, on va voir qu'on peut trouver des

cas pour lesquels la phase de Lewis et Riesenfeld ait un aspect géométrique. Comme il a été montré dans le paragraphe précédent, la condition d'adiabaticité n'est plus nécessaire pour assurer l'existence d'une phase géométrique si l'évolution en question est cyclique. Le problème qui se pose est la détermination des états cycliques $|\tilde{\psi}(t)\rangle$.

En fait, il est assez surprenant que les phases géométriques n'ont pas été découvertes plus tôt. En fait, il y a quelques articles plus anciens [34, 53, 124] dans la littérature où les auteurs étaient très proches de la découverte de la phase géométrique. Peut-être l'un des plus importants d'entre eux est le papier classique de Lewis et Riesenfeld [13] sur les invariants dynamiques. La correspondance entre la phase de Berry et la phase de Lewis et Riesenfeld a été soulignée pour la première fois par D. A Morales [125]. En 1994, Monteoliva *et al.* [126] ont développé un formalisme pour calculer les phases de Berry pour les systèmes quantiques périodiques non-adiabatiques quand un invariant dynamique est connu ; en fait, une voie normale d'obtenir une telle base des états cycliques est de considérer les vecteurs propres d'un invariant périodique hermitien. Ils ont montré que si un opérateur invariant périodique ayant un spectre non dégénérée est connu, on pourrait alors obtenir tous les états cycliques purs en termes des états propres de $I(0)$ et calculer les phases géométriques correspondantes directement en termes des états propres de $I(t)$. Monteoliva *et al.* ont également souligné que, pour un Hamiltonien périodique $H(t)$, leur méthode était plus commode que de procéder à une décomposition de Floquet [127] de l'opérateur évolution temporelle $U(t)$

$$U(t) = Z(t)e^{iM(t)} \quad (207)$$

et l'obtention des états cycliques purs en tant qu'états propres de l'opérateur $M(t)$, comme initialement proposé par D. J. Moore et G. E. Stedman [128, 129] (voir aussi l'article de G. B. Furman [130]). Leur méthode a été appliquée à l'oscillateur harmonique généralisé et au système à deux niveaux, où les opérateurs invariants sont explicitement construits. Des formules pour les phases de Berry conventionnelles sont aisément obtenues en prenant la limite adiabatique des résultats exacts. Plus tard, A. Mostafazadeh [131] a généralisé les résultats de Monteoliva *et al.* [126] aux évolutions cycliques dégénérées où il a analysé la relation entre les invariants dynamiques périodiques et les opérateurs de Floquet. Très récemment, C.Y. Jeffrey Teo *et al.* [132] ont généralisé la théorie des phases géométriques à une évolution cyclique de l'espace propre d'un opérateur invariant de dégénérescence d'ordre N . La phase géométrique correspondante est interprétée en tant qu'une holonomie recueilli du faisceau universel de Stiefel sur une variété Grassmannienne.

Ainsi, on peut noter que l'analyse de Berry correspond au cas où $I(0) = H(0)$ dans le cas d'une évolution adiabatique tandis que celle de Aharonov-Anandan au cas $I(0) = |\tilde{\psi}(0)\rangle\langle\tilde{\psi}(0)|$ (plus une évolution cyclique).

D'après la discussion ci-dessus, un moyen de trouver les états cycliques est donc l'utilisation d'un invariant périodique

$$I(T) = I(0) \quad (208)$$

Pour un invariant T -périodique (208) et un Hamiltonien T -périodique $H(T) = H(0)$, les vecteurs d'état initiaux

$$|\psi_n(0)\rangle = |\varphi_n(0)\rangle \quad (209)$$

subissent des évolutions cycliques ayant une forme analogue à (191)

$$|\psi_n(T)\rangle = e^{i\theta_n(T)}|\varphi_n(0)\rangle \quad (210)$$

où $\theta_n(T)$ représente la phase de Lewis et Riesenfeld.

Ainsi on peut traiter la phase géométrique dans l'évolution d'un espace propre de l'opérateur invariant dans le cadre de la théorie de Aharonov-Anandan. Dans le cas actuel, chaque espace propre de l'opérateur invariant est un rayon dans l'espace de Hilbert et par conséquent est un point dans l'espace de Hilbert projectif, de sorte que l'évolution des espaces propre correspond exactement à l'évolution des états physiques purs. En choisissant des projecteurs élémentaires dépendant du temps sur l'état propre $|\varphi_n(t)\rangle$ de l'invariant $I(t)$ tels que

$$|\psi_n(t)\rangle\langle\psi_n(t)| = |\varphi_n(t)\rangle\langle\varphi_n(t)| \quad (211)$$

$$|\psi_n(0)\rangle = |\varphi_n(0)\rangle = |\varphi_n(T)\rangle \quad (212)$$

alors l'évolution cyclique peut être obtenus formellement à partir de l'évolution exacte (107) en termes de l'opérateur d'évolution comme

$$U(T, 0)P_n(0) = P_n(0)U(T, 0) \quad (213)$$

En suivant la même approche de ce travail et en utilisant l'équation (141), l'évolution cyclique dans le cas du spectre continu est décrite par

$$U(T, 0)\delta P(k, 0) = \delta P(k, 0)U(T, 0) \quad (214)$$

et les états cycliques

$$|\psi(k, 0)\rangle = |\varphi(k, 0)\rangle \quad (215)$$

pour l'évolution en question sont avec précision les états propres de $U(T, 0)$ correspondant aux phases propre $\theta(k, T)$, comme on peut le voir de (214), c'est-à-dire chaque état revient à lui-même après un temps T (dans l'évolution associée à $H(t)$ à un facteur de phase $\theta(k, T)$ près).

Chapitre IV

Aspect géométrique de la matrice S

CH IV - ASPECT GEOMETRIQUE DE LA MATRICE S

I. 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 général des phénomènes de collisions entres particules. En mécanique classique, ça revient à déterminer les différentes vitesses et énergies ainsi que le paramètre d'impact de la collision [37, 132]. Par contre, en mécanique quantique on s'intéresse au calcul des différentes probabilités possibles [1,2, 5, 6, 27, 28, 36, 70]. Parmi les grandeurs les plus importantes dans la théorie de diffusion quantique, on a *la matrice de diffusion* ou *la matrice S*; en effet, les différentes probabilités précédentes se déduisent directement à travers les éléments de la matrice S.

Le but de ce chapitre est d'établir un lien direct entre la matrice S et la phase géométrique généralisée (adiabatique et cyclique) obtenue plus haut dans le cas d'une diffusion élastique. Ce résultat est dû au fait qu'on a généralement affaire avec des spectres continus dans la théorie de diffusion. De plus, il est connu qu'en suivant une approche dépendant du temps on aboutit à des résultats analogues à ceux obtenus par la théorie de diffusion : 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 [1, 6, 27].

En effet, R. G. Newton a démontré, dans un travail récent [19], 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 [19]). 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 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 [20], 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, 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 [20]). 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 premier 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 précédemment.

L'idée est d'appliquer le théorème adiabatique généralisé ci-dessus pour le cas adiabatique en premier lieu. Dans une deuxième partie, et du fait que le processus de diffusion est un processus cyclique, on va appliquer la théorie des invariant généralisée aux cas des spectres continus ainsi que la phase de Aharonov-Anandan. 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 chapitre 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 une 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.

II. L'aspect géométrique de la matrice S :

1) *Représentation interaction et matrice S :*

Pour définir la matrice S, on doit d'abord se mettre dans la représentation interaction. En effet, considérons l'équation de Schrödinger (1) où l'Hamiltonien est défini par

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (216)$$

où

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} \quad (217)$$

est l'Hamiltonien libre et $V(t)$ le potentiel sur lequel sera diffusée la particule libre. La collision est supposée élastique, d'où

$$E(k, t) = E(k), \quad \forall t \quad (218)$$

Aucune condition sur l'ordre de grandeur du potentiel n'est imposée, sauf qu'il doit vérifier les deux conditions suivantes

$$\lim_{t \rightarrow t_0} V(t) = 0 \quad (219)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_f = t_0 + T} V(t) = 0 \quad (220)$$

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 , l'état de la particule est donnée par

$$|\psi(t)\rangle = \int \hat{C}^{t_0}(k, t) |\Phi(k, t_0)\rangle dk \quad (221)$$

où les fonctions $|\Phi(k, t_0)\rangle$ sont solutions de l'équation aux valeurs propres suivante

$$H_0 |\Phi(k, t_0)\rangle = E(k) |\Phi(k, t_0)\rangle \quad (222)$$

et les coefficients $\hat{C}^{t_0}(k, t)$ sont donnés par

$$\hat{C}^{t_0}(k, t) = C^{t_0}(k, -\infty) e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^t E(k) dt'} \quad (223)$$

pour simplifier, on suppose que la particule se trouve à $t \rightarrow -\infty$ dans l'état $k = k_0$, c'est-à-dire

$$C^{t_0}(k, -\infty) = \delta(k - k_0) \quad (224)$$

Pour $t > t_0$, l'état de la particule est donnée par

$$|\psi(t)\rangle = \int C(k, t) |\varphi(k, t)\rangle dk \quad (225)$$

où $\{|\varphi(k, t)\rangle\}$ représente une base de l'espace de Hilbert. En outre, la fonction $|\psi(t)\rangle$ peut être développée sur la base des vecteurs $|\Phi(k, t_0)\rangle$, on obtient

$$|\psi(t)\rangle = \int C^{t_0}(k, t) |\Phi(k, t_0)\rangle dk \quad (226)$$

où les coefficients $C^{t_0}(k, t)$ sont liés aux coefficients $C(k, t)$ par

$$C^{t_0}(k, t) = \int C(k', t) \langle \Phi(k, t_0) | \varphi(k', t) \rangle dk' \quad (227)$$

Les coefficients $C^{t_0}(k, t)$ représentent les éléments de l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ dans la base $|\Phi(k, t_0)\rangle$; en effet, d'après (223), (224) et (225), on a

$$|\psi(t_0)\rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0).dt'} |\Phi(k_0, t_0)\rangle$$

d'où

$$C^{t_0}(k, t) = \langle \Phi(k, t_0) | \psi(t) \rangle = \langle \Phi(k, t_0) | U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0).dt'} \langle \Phi(k, t_0) | U(t, t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle$$

ce qui donne

$$\langle \Phi(k, t_0) | U(t, t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0).dt'} C^{t_0}(k, t) \quad (228)$$

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

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} |\psi(t)\rangle \quad (229)$$

En l'injectant dans l'équation (1), $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ vérifie l'équation de Schrödinger suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \tilde{V}(t) |\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (230)$$

avec

$$\tilde{V}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} V(t) e^{\frac{-i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \quad (231)$$

En appliquant la transformation (229) sur la relation (225), on obtient

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \int C(k, t) |\tilde{\varphi}(k, t)\rangle dk \quad (232)$$

où les vecteurs de base $|\varphi(k, t)\rangle$ se transforment selon la formule suivante

$$|\tilde{\varphi}(k, t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} |\varphi(k, t)\rangle \quad (233)$$

De la même manière, (226) se transforme en

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \int \tilde{C}^{t_0}(k, t) |\Phi(k, t_0)\rangle dk \quad (234)$$

avec

$$\tilde{C}^{t_0}(k, t) = e^{\frac{i}{\hbar} E(k)(t-t_0)} C^{t_0}(k, t) \quad (235)$$

De plus, l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ se transforme en

$$\tilde{U}(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} U(t, t_0) \quad (236)$$

Cet opérateur constitue l'opérateur d'évolution dans la représentation interaction. Ses éléments sont liés à ceux de $U(t, t_0)$ par

$$\langle \Phi(k, t_0) | \tilde{U}(t, t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} E(k)(t-t_0)} \langle \Phi(k, t_0) | U(t, t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle \quad (237)$$

ce qui donne d'après (228) et (235)

$$\langle \Phi(k, t_0) | \tilde{U}(t, t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0).dt'} \tilde{C}^{t_0}(k, t) \quad (238)$$

D'après les conditions (219) et (220), la solution de l'équation de Schrödinger $|\psi(t)\rangle$ vérifient la propriété suivante

$$|\psi(t \leq t_0)\rangle = |\Phi(k, t_0)\rangle = |\psi(t \geq t_f)\rangle \quad (239)$$

Par conséquent, pour un instant $t \geq t_f$, c'est-à-dire après l'interaction, on a

$$\langle \varphi(k, t) | \tilde{U}(t, t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle = e^{\frac{-i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0).dt'} \tilde{C}^{t_0}(k, t) \quad (240)$$

En passant aux limites $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow \infty$ dans l'opérateur d'évolution en représentation interaction on obtient la définition de la matrice S [1, 6, 19, 70], en effet

$$S = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty} \tilde{U}(t, t_0) \quad (241)$$

Alors, en substituant (240) dans la définition ci-dessus, on trouve

$$\langle \varphi(k, +\infty) | S | \Phi(k_0, -\infty) \rangle = \langle \varphi(k, +\infty) | \lim_{t_0 \rightarrow -\infty, t \rightarrow +\infty} \tilde{U}(t, t_0) | \Phi(k_0, -\infty) \rangle = \tilde{C}^{-\infty}(k, +\infty) \quad (242)$$

Ainsi, pour déterminer la matrice S il suffit de déterminer les coefficients $\tilde{C}^{-\infty}(k, +\infty)$. D'après (227) ces derniers sont bien définies si on détermine les coefficients $C(k, t)$. Ces derniers s'obtiennent en insérant le développement (225) dans l'équation de Schrödinger (1), on distingue deux cas.

2) *Le cas adiabatique :*

Dans le cadre de l'approximation adiabatique, la base des vecteurs $|\varphi(k, t)\rangle$ n'est que la base des états propres de L'Hamiltonien, ainsi, on a

$$|\Phi(k, t_0)\rangle = |\varphi(k, t_0)\rangle \quad (243)$$

Les coefficients $C(k, t)$ donnés par la formule (83) s'écrit ici

$$C(k, t) = \delta(k - k_0) \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(k) dt' - \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k, t') \rangle dt' \right] \quad (244)$$

D'après les relations (227), les coefficients $C^{t_0}(k, t)$ sont données par

$$C^{t_0}(k, t) = \langle \varphi(k, t_0) | \varphi(k_0, t) \rangle \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{-i}{\hbar} E(k_0) dt' - \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0, t') \rangle dt' \right] \quad (245)$$

De leurs définitions (235), on obtient pour les coefficients

$$\tilde{C}^{t_0}(k, t) = \langle \varphi(k, t_0) | \varphi(k_0, t) \rangle \exp \left[- \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0, t') \rangle dt' \right] \quad (246)$$

En passant aux limites $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow \infty$, on obtient, d'après (244)

$$\langle \varphi(k, +\infty) | S | \varphi(k_0, -\infty) \rangle = \langle \varphi(k, -\infty) | \varphi(k_0, +\infty) \rangle \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\varphi(k_0, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0, t') \rangle dt' \right] \quad (247)$$

La formule ci-dessus devient en prenant compte de (239) et de (182)

$$\langle \varphi(k, +\infty) | S | \varphi(k_0, -\infty) \rangle = \delta(k - k_0) e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k_0, +\infty)} \quad (248)$$

3) *Le cas non-adiabatique :*

On va maintenant s'intéresser au cas non-adiabatique. D'après les discussions du chapitre précédent, on peut toujours définir une phase géométrique pour une telle évolution à condition qu'elle soit cyclique. En fait, dans le processus de diffusion décrit ci-dessus, la cyclicité est assurée par les formules (219-220) ou (239) ; en effet, si on considère une particule préparé dans un état propre de l'Hamiltonien libre à $t = -\infty$, elle évolue librement jusqu'à ce qu'elle entre dans la région d'interaction, dans laquelle la particule est dispersée élastiquement par le potentiel dépendant du temps. Puis, elle sort de la région d'interaction et évolue librement jusqu'à ce qu'elle soit détectée.

Dans ce travail, on va s'intéresser des états cycliques générés par les états propres de l'invariant supposé périodique. Cette étude va dépendre de la forme de l'invariant qui à son tour dépend de la forme du potentiel $V(t)$. Les processus de diffusion qui seront considérés sont caractérisés par un Hamiltonien libre H_0 régissant l'évolution de l'état avant et après l'interaction, tandis que l'interaction $V(t)$ va prendre la forme particulière

$$V(t) = V(x - vt) \quad (249)$$

avec

$$V(t \rightarrow \pm\infty) = 0 \quad (250)$$

où v est une constante arbitraire qui peut être interprétée comme une vitesse classique.

On montre que l'opérateur donné par

$$I(t) = H(t) - vp = \frac{p^2}{2m} + V(x - vt) - vp \quad (251)$$

est invariant correspondant à l'Hamiltonien, où p est l'impulsion. En effet

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial V(x-vt)}{\partial t} = -i\hbar v \frac{\partial V(x-vt)}{\partial x} \quad (252)$$

de l'autre côté

$$[H(t), I(t)] = [H(t), H(t) - vp] = -v[H(t), p] = -v[V(x - vt), p] = -i\hbar v \frac{\partial V(x-vt)}{\partial x} \quad (253)$$

d'où

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} = [H(t), I(t)] \quad (254)$$

CQFD.

On remarque donc que l'invariant (251) vérifie bien l'équation de Liouville-Von Neumann (84), de plus, la propriété (250) assure la périodicité de l'invariant, en effet

$$I(+\infty) = H(+\infty) - vp = H_0 - vp = I(-\infty) \quad (255)$$

Dans ce cas, la base des vecteurs $|\varphi(k, t)\rangle$ n'est que la base des états propres de l'invariant $I(t)$. Avant d'aller plus loin, on note qu'il est facile de démontrer que les états propres de l'invariant sont liés à ceux de l'Hamiltonien par la relation suivante

$$\varphi(k, x - vt) = e^{\frac{imv}{\hbar}x} \Phi(k, x - vt) \quad (256)$$

où les fonctions d'ondes $\Phi(k, x - vt)$ représentent les fonctions propres instantanées de l'Hamiltonien $H(t)$ correspondant aux valeurs propres

$$E(k) = \lambda(k) + \frac{mv^2}{2} \quad (257)$$

et $\lambda(k)$ sont les valeurs propres de l'invariant. La fonction d'onde $\Phi(k, x - vt_0)$ n'est autre qu'une onde plane, ainsi on a

$$\varphi(k, x - vt_0) = e^{\frac{imv}{\hbar}x} \Phi(k, x - vt_0) = \Phi(k + mv, x - vt_0) \quad (258)$$

Cela est dit, revenons maintenant au problème de la détermination des coefficients $C(k, t)$, qui s'écrit ici, d'après la formule (167)

$$C(k, t) = \delta(k - k_0 + mv) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \quad (259)$$

Cela est dû au fait que l'état de la particule a été choisi pour qu'elle soit donné à t_0 , d'après (223) et (224), par la fonction $\Phi(k_0, x - vt_0)$, autrement dit, par la fonction $\varphi(k_0 - mv, x - vt_0)$.

D'après les relations (227), les coefficients $C^{t_0}(k, t)$ sont données par

$$C^{t_0}(k, t) = \langle \Phi(k, t_0) | \varphi(k_0 - mv, t) \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \quad (260)$$

De leurs définitions (235), on obtient pour les coefficients $\tilde{C}^{t_0}(k, t)$

$$\tilde{C}^{t_0}(k, t) = \langle \Phi(k, t_0) | \varphi(k_0 - mv, t) \rangle \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} E(k) dt' + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \quad (261)$$

Soit maintenant la transformation

$$\varphi(k, x - vt) = e^{\frac{-iv}{\hbar}p(t-t_0)} \varphi(k, x - vt_0) \quad (262)$$

$$e^{\frac{iv}{\hbar}p(t-t_0)} H(t) e^{\frac{-iv}{\hbar}p(t-t_0)} = H(t_0) \quad (263)$$

La formule (261) devient

$$\begin{aligned} \tilde{C}^{t_0}(k, t) &= \langle \Phi(k, t_0) | \varphi(k_0 - mv, t) \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \\ &\exp \left[\int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} E(k) dt' - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t_0) | H(t_0) | \varphi(k_0 - mv, t_0) \rangle dt' \right] \end{aligned} \quad (264)$$

ce qui donne, d'après (258)

$$\begin{aligned} \tilde{C}^{t_0}(k, t) = & \langle \Phi(k, t_0) | \varphi(k_0 - mv, t) \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \\ & \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} E(k) dt' - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\Phi(k_0, t_0) | H(t_0) | \Phi(k_0, t_0) \rangle dt' \right] \end{aligned} \quad (265)$$

$$\begin{aligned} \tilde{C}^{t_0}(k, t) = & \langle \Phi(k, t_0) | \varphi(k_0 - mv, t) \rangle \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \\ & \exp \left[\int_{t_0}^t \frac{i}{\hbar} (E(k) - E(k_0)) dt' \right] \end{aligned} \quad (266)$$

En passant aux limites $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow \infty$, on obtient, d'après (239) et (258)

$$\begin{aligned} \langle \Phi(k, +\infty) | S | \Phi(k_0, -\infty) \rangle = & \langle \Phi(k, -\infty) | \Phi(k_0, +\infty) \rangle e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t (E(k) - E(k_0)) dt'} \\ & \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \end{aligned} \quad (267)$$

En prenant compte de la propriété (239), la formule ci-dessus devient

$$\langle \Phi(k, +\infty) | S | \Phi(k_0, -\infty) \rangle = \delta(k - k_0) \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \quad (268)$$

Afin de garder l'analogie entre les deux cas adiabatique et non-adiabatique, on va utiliser les états propres de l'invariant pour exprimer les éléments de la matrice S, ainsi

$$\langle \varphi(k - mv, +\infty) | S | \varphi(k_0 - mv, -\infty) \rangle = \delta(k - k_0) \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\varphi(k_0 - mv, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0 - mv, t') \rangle dt' \right] \quad (269)$$

ce qui donne

$$\langle \varphi(k, +\infty) | S | \varphi(k_0, -\infty) \rangle = \delta(k - k_0) \exp \left[- \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta\varphi(k_0, t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k_0, t') \rangle dt' \right] \quad (270)$$

ou

$$\langle \varphi(k, +\infty) | S | \varphi(k_0, -\infty) \rangle = \delta(k - k_0) e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k_0, +\infty)} \quad (271)$$

4) Discussion :

Il est clair d'après les deux formules (268) et (271) que la matrice S est diagonale dans la base construite par les vecteurs $|\varphi(k, t_0)\rangle$. En fait, les deux équations sont équivalentes à l'équation aux valeurs propres suivante

$$S|\varphi(k, t_0)\rangle = s_k|\varphi(k, t_0)\rangle \quad (272)$$

par conséquent, les kets $|\varphi(k, t_0)\rangle$ constituent les vecteurs propres de l'opérateur S correspondant aux valeurs propres

$$s_k = e^{\frac{i}{\hbar}\gamma^G(k, +\infty)} \quad (273)$$

Cette expression exprime le lien cherché entre la matrice de diffusion et la phase géométrique généralisée pour les deux cas, d'où l'aspect géométrique de la matrice S. Par conséquent, la relation (273) permet d'interpréter les phases géométriques généralisées obtenues 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 $t(k)$ [4, 6, 20], la relation (273) devient

$$t(k) = e^{\frac{i}{\hbar}\gamma^G(k; +\infty)} \quad (274)$$

Cet important résultat, est une bonne confirmation de la validité du théorème adiabatique généralisé considéré dans le premier chapitre, ainsi que les résultats obtenus dans le chapitre précédent pour le cas non-adiabatique. 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 chapitre suivant, on va reprendre l'un des exemples traités par G. Ghosh [20] où on va voir que la phase géométrique généralisée est une bonne approximation de l'argument de l'amplitude de transmission.

Dans un travail très récent, et comme il a été déjà mentionné dans le chapitre précédent, H. D. Liu et X. X. Yi ont étudié la phase géométrique dans un processus de diffusion avec des degrés de liberté de pseudo-spin et ont exploré la phase géométrique pour un problème de diffusion en ne prenant que le processus de transmission en compte [109].

Chapitre V

Applications

CH V - APPLICATIONS

I. Introduction :

On propose ci-dessous trois exemples d'application pour illustrer les différents résultats obtenus dans ce travail ; dans le premier on va calculer la phase géométrique généralisée pour l'équation de Dirac dans un champ électromagnétique. Dans le deuxième, on va étudier le problème d'une particule soumise à un potentiel linéaire. Finalement, on va étudier la diffusion d'une particule par le potentiel de Pöschl-Teller dans les deux cas adiabatique et non-adiabatique.

II. 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, supposée suffisamment lente, est décrite par l'équation de Dirac *unidimensionnelle* suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_D(t) |\psi(t)\rangle \quad (275)$$

L'Hamiltonien $H_D(t)$ est donné par

$$H_D(t) = c\alpha^3 \cdot \left(p - \begin{pmatrix} f(t) \cdot \mathbb{1} & \mathbb{0} \\ \mathbb{0} & f^*(t) \cdot \mathbb{1} \end{pmatrix} \right) + \beta \cdot m(t)c^2 \quad (276)$$

avec

$$f(t) = f_R(t) + i f_I(t) \quad (277)$$

Le champ électromagnétique est représenté par la fonction $f(t)$ (voir la limite non relativiste plus bas), c est la vitesse de la lumière dans le vide et α^3 et β représentent les matrices de Dirac, données dans la représentation standard par [1]

$$\alpha^3 = \begin{pmatrix} \mathbb{0} & \sigma^3 \\ \sigma^3 & \mathbb{0} \end{pmatrix} \quad (278)$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & \mathbb{0} \\ \mathbb{0} & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (279)$$

avec σ^3 la matrice de Pauli suivant l'axe z [4], 0 et 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

$$H_D(t) = \begin{pmatrix} m(t).c^2.1 & c\sigma^3[p - f(t)] \\ c\sigma^3[p - f^*(t)] & -m(t).c^2.1 \end{pmatrix} \quad (280)$$

ou, d'une manière plus condensée

$$H_D(t) = m(t).c^2 |1\rangle\langle 1| - m(t).c^2 |2\rangle\langle 2| + c\sigma^3[p - f(t)]|1\rangle\langle 2| + c\sigma^3[p - f^*(t)]|2\rangle\langle 1| \quad (281)$$

où les kets $|1\rangle$ et $|2\rangle$ représentent les vecteurs de la base canonique de l'espace des bispineurs définis par

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (282)$$

$$|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (283)$$

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 correspondant à $H_D(t)$.

2) Recherche des vecteurs et valeurs propres :

On montre que l'Hamiltonien admet comme états propres les fonctions normalisée suivantes [21, 22, 71]

$$|\varphi^\pm(k, t)\rangle = \left\{ \frac{c\sigma^3 g(k, t)}{\left[[m(t).c^2 \mp \hbar\omega(k, t)]^2 + |g(k, t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |1\rangle + \frac{m(t).c^2 \mp \hbar\omega(k, t)}{\left[[m(t).c^2 \mp \hbar\omega(k, t)]^2 + |g(k, t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} |2\rangle \right\} \frac{e^{\frac{i}{\hbar}k.z}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (284)$$

correspondant aux valeurs propres

$$E^\pm(k, t) = \pm \hbar\omega(k, t) \quad (285)$$

où

$$\hbar\omega(k, t) = c\sqrt{m^2(t).c^2 + |g(k, t)|^2} \quad (286)$$

et

$$g(k, t) = f(t) - k \quad (287)$$

3) Calcul de la phase géométrique généralisée :

Supposons pour commencer que la particule se trouve à l'instant initial dans l'état

$$|\psi(t_0)\rangle = |\varphi^+(l, t_0)\rangle \quad (288)$$

D'après le théorème adiabatique généralisé, la particule se trouve à l'instant t dans l'état

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[-\phi^+(l, t) + \gamma^{G^+}(l, t)\right]\right\} |\varphi^+(l, t)\rangle \quad (289)$$

avec la phase dynamique

$$\phi^+(l, t) = \int_{t_0}^t c \sqrt{m^2(t).c^2 + |g(l, t)|^2} dt' \quad (290)$$

et la phase géométrique

$$\gamma^{G^+}(l, t) = \int_{t_0}^t \int \langle \varphi^+(l', t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi^+(l, t') \rangle dl' dt' \quad (291)$$

Après quelques calculs numériques, on trouve [21, 22, 71]

$$\begin{aligned} \langle \varphi^+(l', t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi^+(l, t) \rangle &= \left\{ \frac{c\sigma^3 g^*(l', t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l', t)]^2 + |g(l', t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \right. \\ &\times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{c\sigma^3 g(l, t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l, t)]^2 + |g(l, t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) + \frac{m(t).c^2 - \hbar\omega(l', t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l', t)]^2 + |g(l', t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \times \\ &\left. \times i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m(t).c^2 - \hbar\omega(l, t)}{\left[[m(t).c^2 - \hbar\omega(l, t)]^2 + |g(l, t)|^2 c^2 \right]^{\frac{1}{2}}} \right) \right\} \delta(l - l') \end{aligned} \quad (292)$$

En intégrant par rapport à l' et t on trouve

$$\gamma^{G^+}(l, t) = \frac{i\hbar c^2}{2} \int_{t_0}^t \frac{g^*(l, t') \dot{g}(l, t') - \dot{g}^*(l, t') g(l, t')}{\left[[m(t').c^2 - \hbar\omega(l, t')]^2 + |g(l, t')|^2 c^2 \right]} dt' \quad (293)$$

Après une période T , cette phase peut s'écrire

$$\gamma^{G^+}(l, t_0 + T) = \frac{i\hbar c^2}{2} \int_{t_0}^{t_0+T} \frac{f^*(t') \dot{f}(t') - \dot{f}^*(t') f(t') + l(\dot{f}^*(t') - \dot{f}(t'))}{\left[[m(t').c^2 - \hbar\omega(l, t')]^2 + |g(l, t')|^2 c^2 \right]} dt' \quad (294)$$

En utilisant (277), (285) et (286) on trouve

$$\gamma^{G^+}(l, t_0 + T) = \hbar c^2 \oint_C \frac{f_I^2(t) d\left(\frac{f_R(t)-l}{f_I(t)}\right)}{2E^+(l)[E^+(l) - mc^2]} \quad (295)$$

Ainsi, on a obtenu la phase géométrique généralisée correspondant à une particule relativiste qui évolue adiabatiquement dans un champ électromagnétique.

4) *Interprétation de la phase géométrique généralisée :*

Comme on l'avait dit ci-dessus, on va montrer que la phase géométrique généralisée (295) 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 vue 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 [11, 91, 92, 134]. Ainsi, le résultat décrit dans ces références n'est qu'un cas particulier, $l = 0$, de celui obtenu ici.

On se met dans les coordonnées sphériques de l'espace des paramètres

$$f_R + k = \frac{1}{c} E^+(k) \sin(\theta) \cos(\varphi) \quad (296)$$

$$f_I = \frac{1}{c} E^+(k) \sin(\theta) \sin(\varphi) \quad (297)$$

$$mc = \frac{1}{c} E^+(k) \cos(\theta) \quad (298)$$

En utilisant les coordonnées sphériques ci-dessus on trouve

$$\gamma^{G^+}(l, t_0 + T) = \frac{\hbar}{2c} \oint_C \frac{\sin^2(\theta) \sin^2(\varphi) d\left(\frac{\cos(\varphi)}{\sin(\varphi)}\right)}{[1 - \cos(\theta)]} \quad (299)$$

ou

$$\gamma^{G^+}(l, t_0 + T) = -\frac{\hbar}{2c} \oint_C (1 + \sin(\theta)) d\varphi \quad (300)$$

Comme le système subit une évolution cyclique, alors le premier terme de la formule ci-dessus s'annule 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 (296), (297) et (298), le point de coordonnées $(f_R = l, f_I = 0, m = 0)$, voir la figure 9, on a donc

$$\gamma^{G^+}(l, t_0 + T) = -\frac{\hbar}{2} \Omega'(l) \quad (301)$$

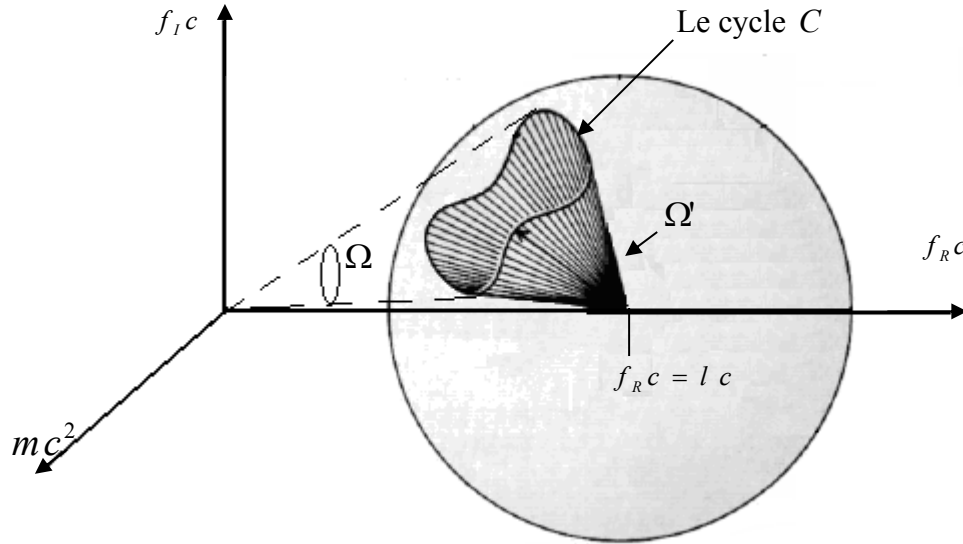


Figure 9 : L'angle solide dans le cas du spectre continu.

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 [11, 91, 92, 134] qui est un cas particulier de $\Omega'(l)$, en effet

$$\Omega'(l = 0) = \Omega \quad (302)$$

5) *La limite non relativiste :*

Dans ce paragraphe, on va voir que la phase géométrique donnée par (295) ou encore (301) est un effet purement relativiste qui disparaît en passant à la limite non relativiste du système (275). Dans cette limite on va voir que ce dernier représente une particule dans un champ électromagnétique où on va identifier les parties réelle et imaginaire du champ complexe $f(t)$ avec le potentiel scalaire et le vecteur potentiel respectivement. Alors, pour passer à la limite non relativiste on effectue la transformation unitaire suivante [1]

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow e^{-\frac{ic^2}{\hbar} \int_{t_0}^t m(t') dt'} |\psi(t)\rangle \quad (303)$$

par conséquent l'équation (275) devient

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + mc^2 \right) |\psi(t)\rangle = H_D(t) |\psi(t)\rangle \quad (304)$$

ce qui donne d'après (281)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = [-2m(t)c^2 |2\rangle\langle 2| + c\sigma^3 [p - f(t)] |1\rangle\langle 2| + c\sigma^3 [p - f^*(t)] |2\rangle\langle 1|] |\psi(t)\rangle \quad (305)$$

En écrivant $|\psi(t)\rangle$ dans la base des bispineurs $|1\rangle$ et $|2\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \psi_1(z, t) |1\rangle + \psi_2(z, t) |2\rangle \quad (306)$$

on obtient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(z, t) = c\sigma^3 [p - f(t)] \psi_2(z, t) \quad (307)$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + 2m(t)c^2 \right) \psi_2(z, t) = c\sigma^3 [p - f^*(t)] \psi_1(z, t) \quad (308)$$

la limite non relativiste consiste à prendre [1]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ll 2m(t)c^2 \quad (309)$$

donc, (307) et (308) donnent

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_1(z, t) = H^{NR}(t) \psi_1(z, t) \quad (310)$$

où

$$H^{NR}(t) = \frac{[p - f_R(t)]^2}{2m(t)} + \frac{f_I^2}{2m(t)} \quad (311)$$

qui est l'Hamiltonien non relativiste correspondant à (276). Il est clair que cet Hamiltonien représente une particule dans un champ électrique déterminé par le potentiel scalaire définie par

$$eV(t) = \frac{f_I^2}{2m(t)} \quad (312)$$

et un champ magnétique défini par le vecteur potentiel suivant

$$eA(t) = f_R(t) \quad (313)$$

L'hamiltonien (311) admet comme vecteurs propres les fonctions d'onde

$$\psi_1(z, k, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\left(k + \frac{f_R}{\hbar}\right)z} \quad (314)$$

correspondant aux énergies suivantes

$$E(k, t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m(t)} + \frac{f_I^2}{2m(t)} \quad (315)$$

En appliquant les résultats de troisième chapitre, la phase géométrique généralisée correspondant à ce système est donnée selon (182) par

$$\gamma^G(l, t) = \int_{t_0}^t \frac{1}{2\pi} \iint e^{-i\left(l' + \frac{f_R}{\hbar}\right)z} i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} e^{i\left(l' + \frac{f_R}{\hbar}\right)z} dz dl' dt' = - \int_{t_0}^t \frac{\dot{f}_R}{2\pi} \iint z e^{i(l-l')z} dz dl' dt' \quad (316)$$

ce qui donne

$$\gamma^G(l, t) = -i \int_{t_0}^t \dot{f}_R \int \delta^{(1)}(l - l') dl' dt' = 0 \quad (317)$$

Ainsi, on voit que dans la limite non relativiste le système (275) n'admet pas une phase géométrique généralisée.

III. Une particule dans un champ homogène :

Considérons maintenant une particule dans un champ homogène décrite par l'Hamiltonien suivant [6]

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + f(t)x \quad (318)$$

où p représente l'impulsion de la particule et $m(t)$ et $f(t)$ sont des fonctions qui dépendent *aléatoirement* du temps.

1) Le potentiel linéaire dans la littérature :

L'évolution temporelle d'un système quantique soumis à une force uniforme et dépendant du temps a attiré un intérêt considérable dans les dernières années. Le propagateur exact de ce système [135] ainsi que les solutions exactes de Volkov [136, 137] sont connus depuis longtemps. Plusieurs travaux récents [138-147] se sont concentrés sur les solutions exactes et leurs propriétés physiques et mathématiques. Tout d'abord, I. Guedes [139] a obtenu une solution spéciale pour le potentiel linéaire dépendant du temps en utilisant les

opérateurs invariants. Plus tard, M. Feng [140] a suivi une méthode basée sur des transformations spatio-temporelle de l'équation de Schrödinger pour obtenir des solutions en termes des ondes planes et des fonctions d'Airy. La solution de Guedes n'est, en fait, qu'un cas particulier de celle de Feng. Cependant, H. Bekkar *et al.* [141] ont souligné que la solution d'Airy n'est, en fait, qu'une superposition de solutions de type ondes planes. Dans son commentaire [142], J. Bauer a expliqué que la solution trouvée par Guedes [139] était simplement un cas particulier de la solution de Volkov, avec un vecteur d'onde $k = 0$, de l'équation de Schrödinger dépendant du temps décrivant une particule chargée non relativiste se déplaçant dans un champ électromagnétique. J. Dunkel et S. A. Trigger [144] ont examiné l'incertitude initiale minimum des solutions de type gaussien pour un potentiel linéaire sinusoïdale en fonction du temps. G. E. Bowman [145] a étudié l'évolution temporelle de l'état général du système quantique linéaire dépendant du temps, ce qui s'est avéré être celui d'une particule libre plus un mouvement global découlant de la force classique. S. P. Kim [146] a montré qu'une particule libre chargée dans un champ électrique constant et/ou oscillant possède un paquet d'ondes gaussien (POG). En utilisant la méthode des fonctions d'essai, Gengbiao Lu *et al.* [147] ont construit une solution exacte dont le centre se déplace le long de la trajectoire classique.

Très récemment, P-G. Luan et C-S. Tang [43] ont réexaminé l'invariant linéaire proposé par Guedes [139] et ont indiqué que, outre les solutions décrites dans les références [139–142], une solution sous forme de POG pourrait naturellement être dérivée de la méthode de Lewis et Riesenfeld si un invariant linéaire non-hermitien est utilisé. Dans un autre article récent, M. Maamache *et al.* [148] ont montré qu'on peut toujours obtenir des solutions en termes de POG même pour une valeur non nulle du paramètre B de [143]. L'invariant linéaire proposé est démontré comme étant un opérateur hermitien ayant des fonctions propres sous formes de POG. Dans un premier papier L. Krache *et al.* [26] ont montré, en utilisant la théorie des invariant et les transformations unitaire, que l'équation de Schrödinger avec un potentiel linéaire dépendant du temps possède une chaîne infinie de paquets d'ondes reproduisant le mouvement classique. Les différentes possibilités de la nature du spectre de l'invariant (discret ou continu) ont été décrits séparément pour les différentes valeurs de la fréquence d'un oscillateur harmonique. Ensuite, L. Krache *et al.* [149] ont utilisé une approche de paquets d'ondes pour analyser la dépendance temporelle non-triviale des solutions d'un système mécanique quantique décrivant une particule dans un potentiel linéaire. L. Krache *et al.* ont trouvé un lien entre le système d'une particule libre avec celui

d'une particule dans un potentiel linéaire dépendant du temps en utilisant l'hypothèse de L. De Broglie.

2) Application de la théorie des invariants généralisée :

Afin trouver des solutions exacte pour le problème (318) on propose un invariant général sous la forme

$$I(t) = a(t)p^2 + b(t)p + c(t)x + d(t) \quad (319)$$

où les fonctions $a(t)$, $b(t)$, $c(t)$ et $d(t)$ sont déterminées en insérant l'invariant $I(t)$ dans l'équation de Liouville-Von Neumann (84), en effet

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} = \dot{a}(t)p^2 + \dot{b}(t)p + \dot{c}(t)x + \dot{d}(t) \quad (320)$$

$$[H(t), I(t)] = \left[\frac{p^2}{2m(t)} + f(t)x, a(t)p^2 + b(t)p + c(t)x + d(t) \right] \quad (321)$$

$$[H(t), I(t)] = \left[\frac{p^2}{2m(t)}, c(t)x \right] + [f(t)x, a(t)p^2 + b(t)p] \quad (322)$$

$$[H(t), I(t)] = \left[i\hbar 2f(t)a(t) - i\hbar \frac{c(t)}{m(t)} \right] p + i\hbar f(t)b(t) \quad (323)$$

Par comparaison, on trouve le système des équations

$$\begin{cases} \dot{a}(t) = 0 \\ \dot{b}(t) = f(t)a(t) - \frac{c(t)}{2m(t)} \\ \dot{c}(t) = 0 \\ \dot{d}(t) = f(t)b(t) \end{cases} \quad (324)$$

qui admet les solutions suivantes

$$\begin{cases} a(t) = a_0 \\ b(t) = 2a_0 \int f(t')dt' - c_0 \int \frac{dt'}{m(t')} + b_0 \\ c(t) = c_0 \\ d(t) = 2a_0 \int f(t') \int f(t'')dt'' dt' - c_0 \int f(t') \int \frac{dt''}{m(t'')} dt' + b_0 \int f(t')dt' + d_0 \end{cases} \quad (325)$$

où a_0 , b_0 , c_0 et d_0 des constantes réelles. Pour des raisons de simplicité, on peut choisir

$$a_0 = 1 \quad (326)$$

$$d_0 = 0 \quad (327)$$

L'équation aux valeurs propres de $I(t)$ s'écrit donc en représentation position

$$\left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i\hbar b(t) \frac{\partial}{\partial x} + c_0 x + d(t)\right] \varphi(k, x, t) = k\varphi(k, x, t) \quad (328)$$

L'idée principale pour la résolution de cette équation est l'utilisation de la transformation unitaire dépendant du temps

$$\Phi(k, x) = \Xi(t)\varphi(k, x, t) \quad (329)$$

avec

$$\Xi(t) = \exp\left[\frac{i}{4\hbar c_0}(b(t)^2 - 4d(t))p\right] \exp\left[\frac{ib(t)}{2\hbar}x\right] \quad (330)$$

On vérifie facilement que l'action de la transformation $\Xi(t)$ sur les opérateurs de position et du moment donne

$$x \rightarrow \Xi(t)x\Xi^+(t) = x + \frac{1}{4c_0}(b(t)^2 - 4d(t)) \quad (331)$$

$$p \rightarrow \Xi(t)p\Xi^+(t) = p - \frac{b(t)}{2} \quad (332)$$

L'action de la transformation $\exp\left[\frac{i}{4\hbar c_0}(b(t)^2 - 4d(t))p\right]$ sur une fonction d'onde dans la représentation position permet d'avoir

$$\exp\left[\frac{i}{4\hbar c_0}(b(t)^2 - 4d(t))p\right] F(x, t) = F\left(x + \frac{1}{4c_0}(b(t)^2 - 4d(t))\right) \quad (333)$$

La transformation $\Xi(t)$ permet donc de passer de l'invariant dépendant du temps (319) avec les paramètres (325), (326) et (327) à l'invariant

$$I_0 = \Xi(t)I(t)\Xi^+(t) = p^2 + c_0 x \quad (334)$$

indépendant du temps. En d'autres termes, l'équation aux valeurs propres (328) se transforme pour donner l'équation d'Airy

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial Z^2} - Z\right] \Phi(k, Z) = 0 \quad (335)$$

où on a introduit la variable

$$Z = \left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(x - \frac{k}{c_0}\right) \quad (336)$$

La solution de l'équation différentielle ordinaire du second ordre (325) est donnée par les fonctions

$$\Phi(k, x) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{c_0 \hbar^4}\right)^{\frac{1}{6}} Ai\left[\left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(x - \frac{k}{c_0}\right)\right] \quad (337)$$

avec Ai la fonction d'Airy définie sous sa forme intégral par

$$Ai(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda x} e^{i\frac{\lambda^3}{3}} d\lambda \quad (338)$$

et qui vérifie la relation d'orthonormalisation

$$\langle \Phi(k) | \Phi(k') \rangle = \delta(k - k') \quad (339)$$

En appliquant la transformation inverse $\Xi^+(t)$ on trouve les fonctions propres de l'invariant $I(t)$

$$\varphi(k, x) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{c_0 \hbar^4} \right)^{\frac{1}{6}} \exp \left[-\frac{ib(t)}{2\hbar} x \right] Ai \left[\left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(x - \frac{b(t)^2 + 4(k-d(t))}{4c_0} \right) \right] \quad (340)$$

D'après les résultats du deuxième chapitre, la solution de l'équation de Schrödinger (1) correspondant à l'Hamiltonien (318) est donnée par (152) et (167), autrement dit

$$\psi(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\theta(k,t)} \varphi(k, x) \quad (341)$$

où la phase totale est donnée par

$$\theta(k, t) = \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] | \varphi(k, t') \rangle dt' \quad (342)$$

En utilisant les propriétés de la fonction d'Airy, on trouve la valeur moyenne suivante

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k', t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi(k, t) \rangle &= \frac{\hbar^2}{m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \delta^{(2)}(k - k') - i\hbar \frac{b(t)}{2m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \delta^{(1)}(k - k') - \\ &\frac{1}{2m(t)} \left[k' + \frac{b(t)^2}{4} - d(t) \right] \delta(k - k') \end{aligned} \quad (343)$$

Ce résultats confirme les discussions du deuxième chapitre en ce qui concerne la généralisation directe de la théorie des invariants au cas du spectre continu et donne un exemple concret du développement (137) de la valeur moyenne $\langle \varphi(k', t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi(k, t) \rangle$ en termes de la fonction de Dirac et ses dérivées. En effet, pour $k = k'$ il est clair que (343) diverge

$$\begin{aligned} \langle \varphi(k, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi(k, t) \rangle &= \frac{\hbar^2}{m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \delta^{(2)}(0) - i\hbar \frac{b(t)}{2m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \delta^{(1)}(0) - \frac{1}{2m(t)} \left[k' + \right. \\ &\left. \frac{b(t)^2}{4} - d(t) \right] \delta(0) \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (344)$$

Par contre, l'utilisation des résultats de ce travail concernant le remplacement des fonctions d'onde par des différentielles propres permet d'éliminer la fonction de Dirac ainsi que ses dérivées, ce qui donne

$$\langle \delta\varphi(k, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi(k, t) \rangle = \int \left\{ \frac{\hbar^2}{m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \delta^{(2)}(k - k') - i\hbar \frac{b(t)}{2m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \delta^{(1)}(k - k') - \frac{1}{2m(t)} \left[k' + \frac{b(t)^2}{4} - d(t) \right] \delta(k - k') \right\} dk' \quad (345)$$

$$\langle \delta\varphi(k, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi(k, t) \rangle = \left[\frac{\partial^2}{\partial k'^2} \frac{\hbar^2}{m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \right]_{k'=k} - \left[\frac{\partial}{\partial k'} i\hbar \frac{b(t)}{2m(t)} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \right]_{k'=k} - \frac{k + \frac{b(t)^2}{4} - d(t)}{2m(t)} \quad (346)$$

ainsi

$$\langle \delta\varphi(k, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \varphi(k, t) \rangle = - \frac{k + \frac{b(t)^2}{4} - d(t)}{2m(t)} \quad (347)$$

d'où la phase totale

$$\theta(k, t) = - \int_{t_0}^t \frac{k + \frac{b(t')^2}{4} - d(t')}{2m(t')} dt' \quad (348)$$

IV. Diffusion par le potentiel de Pöschl-Teller modifié :

Cet exemple est consacré à l'illustration de l'aspect géométrique de la matrice S dans les deux cas adiabatique et non-adiabatique. Considérons une particule libre de masse m représentée par une onde plane unidimensionnelle à l'instant $t \rightarrow -\infty$

$$\varphi(k_0, x, -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 \cdot x} \quad (349)$$

L'hamiltonien libre H_0 correspondant est donné par

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} \quad (350)$$

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (351)$$

L'énergie de la particule correspondant à l'état (349) est

$$E(k_0) = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \quad (352)$$

A cette instant, $t \rightarrow -\infty$, on suppose que la particule se trouve à $x \rightarrow -\infty$. Cette particule se propage vers les valeurs croissantes de x où elle sera diffusée par le potentiel de Pöschl-Teller modifié [20, 150] situé au point $x = x_0$ (fig.10), et qui est défini par la formule suivante [20, 150]

$$V(x, x_0) = - \frac{\hbar^2 k_1^2}{m [ch[k_1(x - x_0)]]^2} \quad (353)$$

où k_1 est un paramètre

Bien qu'il soit doublement dégénéré, le système peut être traité comme étant non dégénéré du fait que le potentiel ne contient pas des parties qui donnent naissance à des réflexions. En effet, une particule qui se propage dans une direction ne sera pas réfléchiée par le potentiel (353), ainsi, il n'y aura pas des transitions entre les états d'un même sous-espace dues à la dégénérescence. Alors, le fait que le spectre soit dégénéré ou non ne change rien.

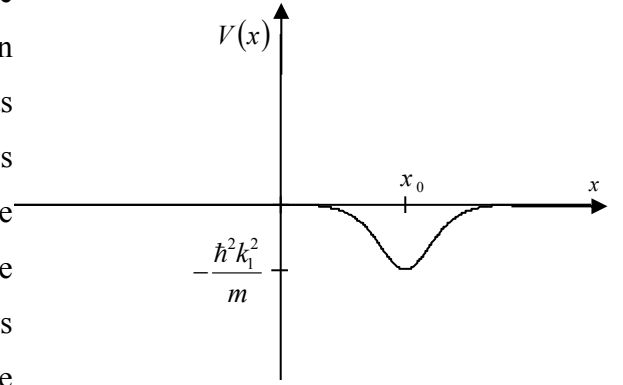


Figure 10 : Le potentiel de Pöschl-Teller modifié.

1) Approche indépendant du temps (solution exacte) :

La particule considérée est décrite par l'Hamiltonien total

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{m [ch[k_1(x - x_0)]]^2} \quad (354)$$

L'équation aux valeurs propres correspondante est donnée, en prenant compte de (351), par

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(k, x, x_0) + V(x, x_0) \varphi(k, x, x_0) = E(k) \varphi(k, x, x_0) \quad (355)$$

Effectuons maintenant le changement de variable suivant [6]

$$\xi = th[k_1(x - x_0)] \quad (356)$$

on obtient l'équation de Legendre [5-7]

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} u(k, \xi) - 2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} u(k, \xi) + \left[n(n+1) - \frac{k^2}{k_1^2 (1 - \xi^2)} \right] u(k, \xi) = 0 \quad (357)$$

avec

$$n = 1 \quad (358)$$

et

$$k^2 = \frac{2mE(k)}{\hbar^2} \quad (359)$$

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

$$E_{n=1, k=k_1} = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m} \quad (360)$$

- $E(k) > 0$: on a un spectre continu dont les états propres sont donnés par [20]

$$\varphi(k, x, x_0) = [ik - k_1 th[k_1(x - x_0)]] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik)} \quad (361)$$

qui correspondent aux valeurs propres $E(k)$ données par (359)

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (362)$$

Selon la théorie de diffusion, l'amplitude de transmission $t(k)$ est définie par la forme asymptotique de la solution $\varphi(k_0, x, x_0)$ pour $x \rightarrow +\infty$

$$\varphi(k_0, x, x_0) \underset{x \rightarrow +\infty}{=} \left[ik_0 - k_1 th[k_1(x - x_0)] \right] \underset{\rightarrow +1}{=} \frac{e^{ik_0 x}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik_0)} = \frac{(-k_1 + ik_0)e^{ik_0 x}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik_0)} = t(k_0)\varphi(k_0, x, -\infty) \quad (363)$$

On obtient alors l'expression suivante pour l'amplitude de transmission

$$t(k_0) = \frac{-k_1 + ik_0}{k_1 + ik_0} = e^{i\delta} \quad (364)$$

la valeur exacte de la phase est donc

$$\delta = 2 \operatorname{arctg} \left(\frac{k_1}{k} \right) \quad (365)$$

Il est clair que le module carré de $t(k_0)$ est égale à 1, et par conséquent l'amplitude de réflexion $r(k_0)$ est nulle [4-6].

2) Approche dépendant du temps :

Pour confirmer les résultats du quatrième chapitre on va considérer cet exemple comme un système dépendant du temps au lieu de le traiter en se basant sur la forme asymptotique des solutions. En effet, on fait dépendre le paramètre de position x_0 du temps de sorte qu'il vérifie les conditions suivantes

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} x_0(t) = +\infty \quad (366)$$

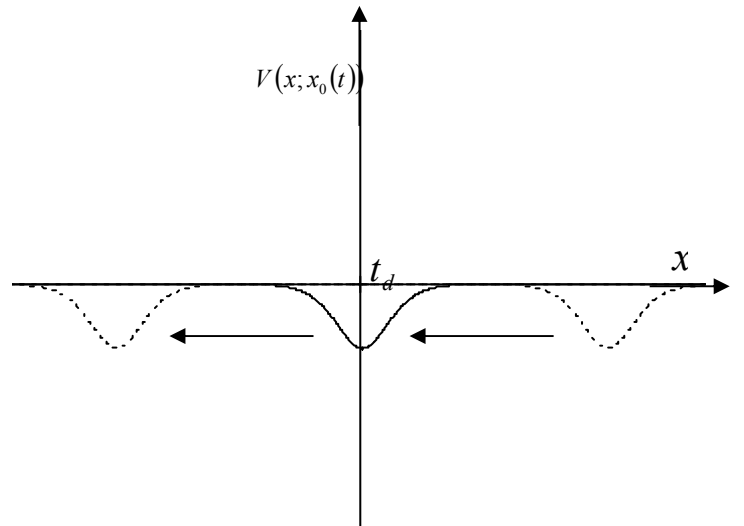


Figure 11 : Les différentes positions du potentiel au cours du temps.

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} x_0(t) = -\infty \quad (367)$$

On se met 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. C'est-à-dire, pour $t \rightarrow -\infty$ le potentiel se trouve localisé à $x \rightarrow +\infty$ 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 $x \rightarrow -\infty$ et la particule devient libre à nouveau (fig. 11).

Par conséquent, le potentiel auquel est soumise la particule est, d'après (353)

$$V(x,t) = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m[c\hbar[k_1(x-x_0(t))]]^2} \quad (368)$$

1. Le cas adiabatique

Supposons que $x_0(t)$ varie lentement en fonction du temps, l'Hamiltonien de la particule prend donc la forme (216), où H_0 est défini par (350). On vérifie que cet Hamiltonien admet les fonctions suivantes comme vecteurs propres normalisés

$$\varphi(k, x, x_0(t)) = [ik - k_1 t \hbar [k_1(x - x_0(t))]] \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik)} \quad (369)$$

correspondant aux valeurs propres $E(k)$ données par (359).

D'après les résultats du premier et du troisième chapitre de ce travail, le système qui se trouve à l'instant $t \rightarrow -\infty$ dans l'état donné par (349) évolue à l'instant t , d'après (180), vers l'état

$$\psi(x,t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi(k_0,t) + \gamma^G(k_0,t)]\right\} \varphi(k_0, x, x_0(t)) \quad (370)$$

avec

$$\phi(k_0, t) = \int_{t_0}^t E(k_0) dt' = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} (t - t_0) \quad (371)$$

et

$$\gamma^G(k_0, t) = \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(k', x, x_0(t')) i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \varphi(k_0, x, x_0(t')) dx dk' dt' \quad (372)$$

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 (229) et (233)

$$\tilde{\psi}(x, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[-\phi(k_0, t) + \gamma^G(k_0, t)]\right\} \tilde{\varphi}(k_0, x, x_0(t)) \quad (373)$$

En passant aux limites $t \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow +\infty$, on s'attend d'après le paragraphe précédent que $\gamma^G(k_0, +\infty)$ soit une valeur approchée de l'argument δ défini par (365). En effet, lorsque le potentiel s'éloigne vers $x \rightarrow -\infty$ et la particule devient libre, on obtient

$$\tilde{\varphi}(k_0, x, x_0(+\infty)) = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} e^{\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}} \varphi(k_0, x, x_0(+\infty)) = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} e^{\frac{iE(k_0)(t-t_0)}{\hbar}} \varphi(k_0, x, x_0(-\infty)) \quad (374)$$

ce qui donne d'après (349) et (371)

$$\tilde{\psi}(x, +\infty) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k_0, +\infty)\right\} \varphi(k_0, x, x_0(-\infty)) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k_0, +\infty)}}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 \cdot x} \quad (375)$$

Après quelques calculs élémentaires l'équation (372) donne

$$\gamma^G(k_0, +\infty) = \frac{2\hbar k_1 k_0}{k_1^2 + k_0^2} \quad (376)$$

On a obtenu donc la phase géométrique généralisée correspondant au système ci-dessus. Ainsi, (375) donne

$$\tilde{\psi}(x; +\infty) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \frac{2k_1 k_0}{k_1^2 + k_0^2}}}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_0 \cdot x} \quad (377)$$

En posant

$$\delta_0 = \frac{\gamma^G(k_0, +\infty)}{\hbar} = \frac{2k_1 k_0}{k_1^2 + k_0^2} \quad (378)$$

on voit qu'on a obtenu exactement le même résultat de G. Ghosh (formule (12) de [20]). En effectuant les développements de Taylor de δ_0 et δ en fonction du rapport $\frac{k_1}{k_0}$ on obtient

$$\delta = 2\frac{k_1}{k_0} - \frac{2}{3}\left(\frac{k_1}{k_0}\right)^3 + \frac{2}{5}\left(\frac{k_1}{k_0}\right)^5 + \dots \quad (379)$$

$$\delta_0 = 2\frac{k_1}{k_0} - 2\left(\frac{k_1}{k_0}\right)^3 + 2\left(\frac{k_1}{k_0}\right)^5 + \dots \quad (380)$$

On remarque qu'au premier ordre on a

$$\delta_0 = \delta \quad (381)$$

En réalité, l'approximation ci-dessus ne présente pas une grande erreur (voir fig. 12) : en effet, d'après la figure 10, la valeur maximale du potentiel est donnée par

$$|V_{\max}| = \frac{\hbar^2 k_1^2}{m} \quad (382)$$

par conséquent, pour les valeurs de k_0 tels que

$$E(k_0) \leq |V_{\max}|$$

c'est-à-dire, pour

$$\frac{k_1}{k_0} \geq \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (383)$$

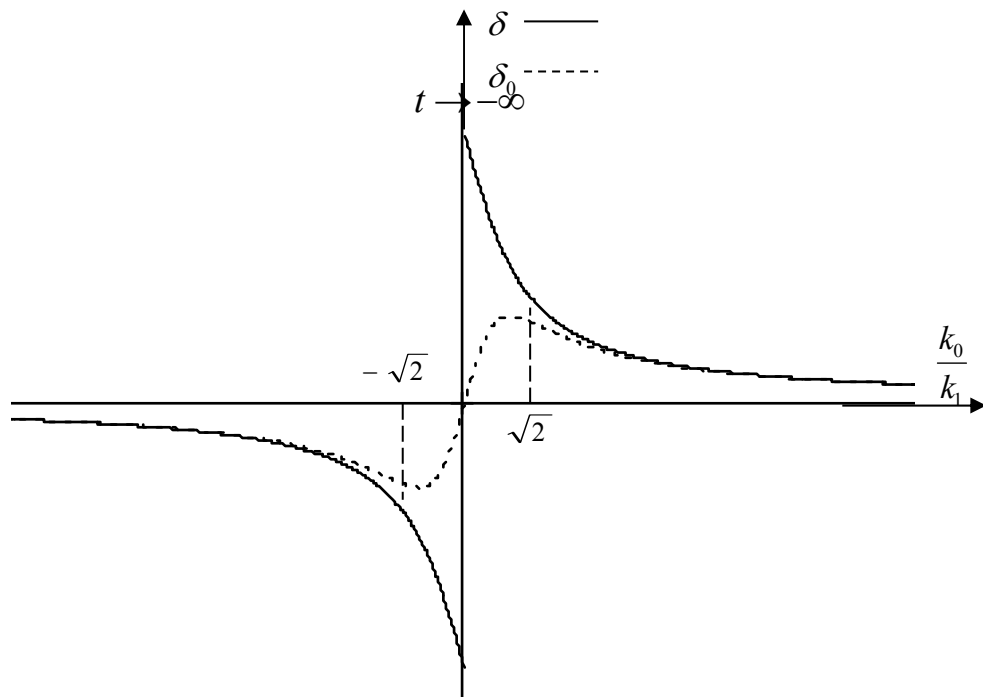


Figure 12 : Les courbes de la phase géométrique généralisée et de l'argument de l'amplitude de transmission.

la particule sera piégée par le potentiel et appartient à l'état lié $P_n^\varepsilon(\xi)$ correspondant à l'énergie (360), on sort donc du spectre continu. Par conséquent, pour rester dans le spectre continu on a

$$\frac{k_1}{k_0} \ll \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (384)$$

La figure 12, représente les courbes de δ_0 et δ en fonction du rapport $\frac{k_1}{k_0}$. On voit que les deux courbes coïncident pour les valeurs de k_0 vérifiant la condition (384) ; plus l'énergie de la particule est grande, plus l'erreur commise dans (381) est petite.

Ainsi, on a obtenu les mêmes résultats en utilisant deux approches différentes et on a confirmé le résultat (274), d'où la confirmation de l'aspect géométrique de la matrice S.

2. Le cas non-adiabatique

Afin d'illustrer les résultats du quatrième chapitre, où on a traité la diffusion par des potentiels de la forme (249), considérons le cas particulier

$$x_0(t) = v \cdot t \quad (385)$$

où v est une constante qu'on peut interpréter comme une vitesse.

D'après (251), l'invariant correspondant au système décrit par l'Hamiltonien (354) avec (385) prend la forme

$$I(t) = H(t) - vp = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_1^2}{m[ch[k_1(x-vt)]]} - vp \quad (386)$$

On montre facilement que les vecteurs propres de cet invariant sont données par

$$\varphi(k, x, t) = [ik - k_1 th[k_1(x-vt)]] \frac{e^{i\left(k + \frac{mv}{\hbar}\right)x}}{\sqrt{2\pi(k_1 + ik)}} \quad (387)$$

correspondant aux valeurs propres

$$\lambda(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{v^2}{2m} \quad (388)$$

En appliquant les résultats du deuxième chapitre concernant le cas du spectre continu, la phase totale est donnée par

$$\theta(k, t) = \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k, t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] | \varphi(k, t') \rangle dt' \quad (389)$$

On trouve

$$\theta(k, t) = -\frac{\hbar \left[k - \frac{mv}{\hbar} \right]^2}{2m} (t - t_0) \quad (390)$$

La solution générale du problème est donc donnée par

$$\psi(x, t) = \int C_k \exp \left[-i \frac{\hbar \left[k - \frac{mv}{\hbar} \right]^2}{2m} (t - t_0) \right] \varphi(k, x, t) dk \quad (391)$$

correspondant à la condition initiale (349), ce qui implique

$$C_k = \delta \left(k + \frac{mv}{\hbar} - k_0 \right) \quad (392)$$

Ce qui donne, d'après (387) et (391)

$$\psi(x, t) = \frac{i \left(k_0 - \frac{mv}{\hbar} \right) - k_1 t \hbar [k_1 (x - vt)]}{\sqrt{2\pi} \left[k_1 + i \left(k_0 - \frac{mv}{\hbar} \right) \right]} \exp \left\{ i k_0 x - \frac{\hbar \left[k_0 - \frac{2mv}{\hbar} \right]^2}{2m} (t - t_0) \right\} \quad (393)$$

correspondant aux valeurs propres

$$\lambda(k_0) = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - \hbar k_0 v \quad (394)$$

Afin de confirmer les résultats obtenus dans le quatrième chapitre, calculons la partie géométrique de la phase totale, c'est-à-dire

$$\gamma^G(k_0, t) = \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int \varphi^*(k', x, t') i \hbar \frac{\partial}{\partial t'} \varphi(k_0, x, t') dx dk' dt' \quad (395)$$

pour $t_0 \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow \infty$, on montre facilement que cette phase vaut

$$\gamma^G(k_0, \infty) = \frac{2\hbar k_1 \left[k_0 - \frac{mv}{\hbar} \right]}{k_1^2 + \left[k_0 - \frac{mv}{\hbar} \right]^2} \quad (396)$$

Ce qui donne d'après (273) et (274)

$$S_{k_0} = t(k_0) = e^{i \hbar \gamma^G(k_0, \infty)} \quad (397)$$

où S_{k_0} représente la valeur propre de la matrice S et $t(k_0)$ l'amplitude de transmission.

Ce résultat confirme les résultats obtenus dans ce travail ainsi que ceux obtenus par G. Ghosh [20] pour le cas du spectre continu ; en effet, pour passer à la limite adiabatique il suffit de prendre le cas où la vitesse de déplacement du potentiel est très petite, c'est-à-dire

$$v \rightarrow 0 \quad (398)$$

Ce qui permet de retrouver le résultat (378).

CONCLUSION

L'objectif de ce travail était de trouver les solutions de l'équation de Schrödinger dépendant du temps pour les systèmes quantiques ayant des spectres continus. Deux méthodes de résolution ont été étudiées en détails, à savoir ; l'approximation adiabatique et la théorie des invariants.

On a proposé une nouvelle 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 arrivé 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 propriété de non croisement (Eq. (23)), la régularité des projecteurs et la longueur de l'intervalle de projection en fonction du paramètre adiabatique (Eq. (51)).

Ensuite et après avoir discuté les différents travaux précédents en clarifiant les différentes erreurs qu'ils contiennent, on a donné une nouvelle approche pour la théorie de Lewis et Riesenfeld. Cette dernière nous a permis de proposer et démontrer une forme généralisée de la théorie des invariants permettant de trouver des solutions exactes pour l'équation de Schrödinger pour les systèmes quantiques ayant des spectres continus.

Parmi les importantes conséquences de ces deux généralisations, on a pu généraliser la notion de la phase géométrique pour le cas du spectre continu dans le cas adiabatique et non-adiabatique. Comme on l'a vu, on a établi une forme analogue à la phase de Berry (dans le cas adiabatique) ou de Aharonov-Anandan (dans le cas non-adiabatique).

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 dans le cas adiabatique. En effet, on a donné 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. En utilisant la théorie des invariants généralisée ainsi que les résultats de Aharonov-Anandan on a démontré que la matrice S conserve son aspect géométrique même si l'évolution est non-adiabatique.

Finalement, à titre d'illustration, on a appliqué les résultats de ce travail sur trois exemples importants, à savoir ; l'équation de Dirac dans un champ électromagnétique

dépendant adiabatiquement du temps où on a pu écrire la phase de Berry généralisée sous la forme d'un angle solide. Une particule dans un potentiel linéaire dépendant aléatoirement du temps où on a calculé la phase Lewis-Riesenfeld généralisée. Finalement, on a traité la diffusion d'une particule par le potentiel de Pöschl-Teller modifié afin d'illustrer l'aspect géométrique de la matrice S dans les deux cas adiabatique et non-adiabatique.

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, les généralisations établies ici constituent une première étape qui ouvre la porte pour d'autres généralisations. 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 ouverts et les systèmes non Hermitiens. 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 le cadre travail.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] A. Messiah, Mécanique quantique T2 (Dunod, Paris, 1995) nouvelle édition.
- [2] G. G. de Polavieja and E. Sjöqvist, *Am. J. Phys.* **66** (5), 431-438 (1998).
- [3] S. Teufel, *Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics*, Lecture Notes in Mathematics 1821 (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 2003).
- [4] C. C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977) nouvelle édition revue, corrigée et augmentée.
- [5] A. Messiah, Mécanique Quantique T1 (Dunod, Paris, 1995) nouvelle édition.
- [6] L. D. Landau et E. Lifchitz, Mécanique quantique (Mir, Moscou, 1967) traduit du russe par Edouard Gloukhian, 2ème édition.
- [7] A. Nikforov et V. Ougarov, *Fonctions spéciales de la physique mathématique* (Office des publications algérienne, traduit du russe par Vladimir Kotliar, version originale, édition Mir 1977).
- [8] H. R. Lewis, JR., *J. Math. Phys.* **9**, 1976-1986 (1968).
- [9] H. R. Lewis, JR. and W. B. Riesenfeld, *J. Math. Phys.* **10**, 1458-1473 (1969).
- [10] S. Pancharatnam, *Proc. Indian Acad. Sci. Sect. A* **44**, 247 (1956).
- [11] M.V. Berry, *Proc. Roy. Soc. London A* **392**, 45 (1984).
- [12] B. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2167 (1983).
- [13] Y. Aharonov and J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1593–1596 (1987).
- [14] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115**, 485-491 (1959).
- [15] Y. Bouguerra, A. Bounames, M. Maamache and Y. Saâdi, *J. Math. Phys.* **49**, 042107 (2008).
- [16] M. Maamache, N. Chaabi and Y. Saâdi, *Phys. Scr.* **79**, 015002 (2009).
- [17] M. Maamache, C. Lahoulou and Y. Saâdi, *Comm. Theor. Phys.* **51**, 803–810 (2009).
- [18] D. Suter, K. T. Mueller, and A. Pines, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1218–1220 (1988).
- [19] R. G. Newton, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 954–956 (1994).
- [20] G. Ghosh, *Phys. Lett. A* **210**, 40-44 (1996).
- [21] M. Maamache and Y. Saâdi, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 150407 (2008).
- [22] M. Maamache and Y. Saâdi, *Phys. Rev. A* **78**, 052109 (2008).
- [23] Y. Saâdi and M. Maamache, *AIP Conf. Proc.* **1444**, 443 (2012).
- [24] Y. Saâdi and M. Maamache, *Phys. Lett. A* **376** 1328–1334 (2012).
- [25] M. Maamache and Y. Saâdi, arXiv: 0804.4289 v1 [quant-ph].
- [26] L. Krache, M. Maamache, Y. Saâdi and A. Beniaiche, *Chin. Phys. Lett.* **26**, No. 7, 070307 (2009).
- [27] C. C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique T2 (Hermann, Paris, 1977) nouvelle édition revue, corrigée et augmentée.
- [28] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* (Prentice Hall, Inc. Toronto 1995).
- [29] M. Maamache, *J. Math. Phys.* **39** (1), 161-169 (1998).
- [30] S. Ryu and Y. Hatsugai, *Am. Phys. Soc.*, APS March Meeting, March 13-17, (2006).
- [31] D Ahrensmeier, *Can. J. Phy.* **84** (6-7), 645-651 (2006).

- [32] S. Jansen, M. B. Ruskai, and R. Seiler, *J. Math. Phys.* **48**, 102111 (2007).
- [33] Z. Wei and M. Ying, [quant-ph/0604077](#).
- [34] M. Born and V. Fock, *Z. Phys.* **51**, 165-180 (1928).
- [35] P. Ehrenfest, *Ann. Phys.* **51**, 327–352 (1916).
- [36] A. Galindo AD P. Pascual, *Quantum Mechanics* (Springer, Verlag, Berlin, Heidelberg, New York 1991).
- [37] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley 1980).
- [38] J. E. Avron – *Adiabatic Quantum Transport* (Les Houches, E. Akkermans, *et. al.* eds. Elsevier Science 1995).
- [39] X. X. Yi, D. M. Tong, L. C. Kwek and C. H. Oh, [quant-ph/0606203](#).
- [40] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek and C. H. Oh, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 110407 (2005).
- [41] J. E. Avron, R. Seiler and L. G. Yaffe, *Comm. Math. Phys.* **110**, 33-49 (1987).
- [42] A. K. Pati and A. K. Rajagopal, [quant-ph/0405129](#).
- [43] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, X. J. Fan, C. H. Oh, *Phys. Let. A* **339** (3-5), 288-293 (2005).
- [44] J. A. Jones and A. Pines, *Chem. Phys. Lett.* **247** (3), 215-220 (1995).
- [45] A. Ambainis, O. Regev, [quant-ph/0411152](#).
- [46] B. Reichardt. The quantum adiabatic optimization algorithm and local minima. In *Proc. 36th STOC*, pages 502–510, (2004).
- [47] M. Gell-Mann, F. Low, *Phys. Rev.* **84**, 350 (1951).
- [48] S. Duki, H. Mathur and O. Narayan, [quant-ph/0510131](#).
- [49] J. E. Avron and A. Elgart, [math-ph/9810004](#).
- [50] J. E. Avron, A. Elgart, *Phys. Rev. A* **58**, 4300–4306 (1998).
- [51] A. Mostafazadeh, *Phys. Lett. A* **232**, 395-398 (1997).
- [52] J. E. Avron ad A. Elgart, *Comm. Math. Phys.* **203**, 445-463 (1999).
- [53] T. Kato, *Phys. Soc. Jap.* **5**, 435–439 (1950).
- [54] A. Lenard, *Ann. Phys.* **6**, 261-276 (1959).
- [55] L. M. Garrido, *J. Math. Phys.* **5**, 355-362 (1964).
- [56] S. J. Sancho, *Proc. Phys. Soc. Lond.* **89**, 1-5 (1966).
- [57] G. Nenciu, *Comm. Math. Phys.* **82**, 121-135 (1981).
- [58] A. Joye and C. Pfister, *J. Phys. A* **24**, 753 (1991).
- [59] K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160408 (2004).
- [60] Z. Wu and H. Yang, *Phys. Rev. A* **72**, 012114 (2005).
- [61] S. Duki, H. Mathur and O. Narayan, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 128901 (2006).
- [62] J. Ma, Y. Zhang, E. Wang and B. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 128902 (2006).
- [63] K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 128903 (2006).
- [64] M. S. Sarandy, L.-A. Wu and D. A. Lidar, *Quant. Inf. Proc.* **3**, 331 (2004).
- [65] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek and C. H. Oh, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 150402 (2007).
- [66] R. MacKenzie, E. Marcotte and H. Paquette, *Phys. Rev. A* **73**, 042104 (2006).
- [67] F. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems*, *Lecture Notes in Mathematics*, Vol. 1687 (Springer, Berlin, 1998).

- [68] A. Elgart and J. H. Schenker, *Rev. Math. Phys.* **14**, 569-584 (2002).
- [69] M. B. Ruskai, [quant-ph/0203127](#).
- [70] W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction* (Springer, Germany 2000) 4. ed.
- [71] Y. Saâdi, Généralisation du théorème adiabatique pour le spectre continu, mémoire de Magister, soutenue publiquement le 02/06/20007 à l'université Ferhat Abbas – Sétif, Algérie.
- [72] J. Von Neumann, *les fondements quantiques de la mécanique quantique* (Jacques Gabay, Paris 1947).
- [73] R. Courant, D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics V1* (Interscience Publishers. Inc., New York 1953).
- [74] V. I. Yukalov, *Phys. Rev A* **79**, 052117 (2009).
- [75] I. A. Pedrosa, *Phys. Rev. A* **55**, 3219 (1997).
- [76] L. Schwartz, *Théorie des Distributions* (Hermann, Paris 1967).
- [77] J.G. Hartley and J.R. Ray, *Phys. Rev. A* **25**, 2388 (1982).
- [78] X-C. Gao, J-B. Xu and T-Z. Qian, *Phys. Rev. A* **44**, 7016 (1991).
- [79] I. A. Pedrosa and I. Guedes, *Mod. Phys. Lett. B* **16**, 637 (2002);
- [80] I. A. Pedrosa and I. Guedes, *Int. Jour. Mod. Phys. A* **19**, 4165 (2004).
- [81] I A Pedrosa, A. Rosas and I Guedes, *J. Phys. A* **38**, 7757 (2005).
- [82] I. A. Pedrosa, C. Furtado, A. Rosas, *Phys. Lett. B* **651**, 384 (2007).
- [83] J. R. Choi, *Int. Jour. Of Mod. Phys. B* **18**, 1007 (2004).
- [84] J. R. Choi, *Mod. Phys. Lett. B* **21**, 585 (2007).
- [85] A. K. Pati, *Ann. Phys.* **270** (1), 178-197 (1998).
- [86] D. Suter, G. Chingas, R. Harris and A. Pines, *Mol. Phys.* **61**, 1327–1340 (1987).
- [87] X. B. Wang, L. C. Kwek and C. H. Oh, *Phys. Rev. A* **62**, 032105 (2000).
- [88] B. P. Hou and S. J. Wang, *Phys. Lett. A* **311**, 106–110 (2003).
- [89] E. J. Galvez and M. A. O'Connell, *Nanomanipulation with Light*. Edited by Andrews, David L. *Proceedings of the SPIE*, **5736**, 166-172 (2005).
- [90] K. Matsumoto, [quant-ph/0006076](#).
- [91] M. V. Berry, *Scientific American*, **259** (6), 26-34 (1988).
- [92] M.V. Berry, *Physics Today*, **43** (12), 34-40 (1990).
- [93] S. Pancharatnam, *Collected Works of S. Pancharatnam* (Oxford: University Press 1975).
- [94] J. H. Hannay, *J. Phys. A* **18**, 221 (1985).
- [95] D. Xu, *J. phys. A: Math. Gen.* **35**, L455-L457 (2002).
- [96] J. Anandan, Y. Aharonov, *Phys. Rev. D* **38**, 1863–1870 (1988).
- [97] J. Liu, B. Hu, B. Li, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1749–1753 (1998).
- [98] O. V. Usatenko, J-P. Provost and G. Vallée, *J. Phys. A: Gen.* **29**, 2607-2619 (1996).
- [99] M. V. Berry, *J. Phys. A: Math. Gen.* **30**, 8355-8362 (1997).
- [100] A. Shapere and F. Wilczek, *Geometric Phases in Physics* (World Scientific, Singapore, 1989).
- [101] G. De Chiara and G. M. Palma, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 090404 (2003).

- [102] R. Simon and N. Mukunda, Phys. Rev. Lett. **70** (7), 880-883 (1993).
- [103] T. Bitter and D. Dubbers, Phys. Rev. Lett. **59**, 251 (1987)
- [104] A. Tomita and R. Y. Chiao, Phys. Rev. Lett. **57**, 937 (1986)
- [105] J. Anandan and A. Pines, Phys. Lett. A **141**, 335-339 (1989).
- [106] D. Basu, Dictionary of Material Science and High energy physics (CRC Press LLC 2001).
- [107] A. Hamma, quant-ph/0602091.
- [108] Z. Tang and D. Finkelstein, hep-th/9604185.
- [109] H. D. Liu and X. X. Yi, Phys. Rev. A **84**, 022114 (2011).
- [110] Y. Gouverneur, Phase de Berry et quantification de skyrmions, Mémoire présenté à l'université de Laval (1998).
- [111] J. Samuel and R. Bhandari, Phys. Rev. Lett. **60**, 2339 (1988).
- [112] C. Z. Ning and H. Haken, Phys. Rev. Lett. **68**, 2109 (1992).
- [113] J. C. Garrison and E. M. Wright, Phys. Lett. A **128**, 177-181 (1988).
- [114] S. I. Chu, Z. C. Wu and E. Layton, Chem. Phys. Lett. **157**, 151 (1989).
- [115] Y. C. Ge and M. S. Child, Phys. Rev. A **58**, 872 (1998).
- [116] J. C. Garrison and R. Y. C'hiao, Phys. Rev. Lett. **60**, 165 (1988).
- [117] V. Bargmann, J. Math. Phys. **5**, 862 (1964).
- [118] M. Maamache and H. Bekkar, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, L359-L364 (2003).
- [119] T. Dass and S. K. Sharma, Mathematical Methods in Classical and Quantum Physics, (Hyderabad: University Press 1998).
- [120] A. Joshi, A. Pati and A. Banerjee, Phys. Rev. A **49**, 5131 (1994).
- [121] A. Blais and A-M. S. Tremblay, quant-ph/0105006.
- [122] S. N. Dolya and O. B Zaslavskii J. Phys. A **33**, L369 (2000).
- [123] D. J. Moore, Phys. Rep. **210**, 1 (1991).
- [124] J. H. Van Vleck, Phys. Rev. **33**, 467 (1929).
- [125] D. A Morales, J. Phys. A: Math. Gen. **21**, L889 (1988).
- [126] D. B. Monteoliva, H. J. Korsch and J. A. Nunez, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 6897 (1994).
- [127] G. Floquet, Ann. Ec. Norm. Sup. **13**, 47 (1883).
- [128] D. J. Moore and G. E. Stedman, J. Phys. A: Math. Gen. **23**, 2049 (1990).
- [129] D. J. Moore, J. Phys. A: Math. Gen. **23**, L665 (1990).
- [130] G. B. Furman, J. Phys. A: Math. Gen. **27**, 6893 (1994).
- [131] A. Mostafazadeh, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 9975 (1998).
- [132] C.Y. Jeffrey Teo and Z. D. Wang, Phys. Rev. Lett. **95**, 050406 (2005).
- [133] L. Landau, E. Lifchitz, Mécanique (Mir, Moscou, réimpression 1988) traduit du russe par Claude Ligny, quatrième édition complétée 1982, 1ère édition 1964.
- [134] M. V. Berry, J. Mod. Optics, **34**, 1401-1407 (1987).
- [135] R. Feynman and A. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [136] W. Gordon, Z. Phys. **40**, 117 (1926).
- [137] D. Volkov, Z. Phys. **94**, 250 (1935).

- [138] A. Rau and K. Unnikrishnan, *Phys. Lett. A* **222**, 304 (1999).
- [139] I. Guedes, *Phys. Rev. A* **63**, 034102 (2001).
- [140] M. Feng, *Phys. Rev. A* **64**, 034101 (2001).
- [141] H. Bekkar, F. Benamira and M. Maamache, *Phys. Rev. A* **68**, 016101 (2003).
- [142] J. Bauer, *Phys. Rev. A* **65**, 036101 (2002).
- [143] P-G. Luan and C-S. Tang, *Phys. Rev. A* **71**, 014101 (2005).
- [144] J. Dunkel and S. A. Trigger, *Phys. Rev. A* **71**, 052102 (2005).
- [145] G. E. Bowman, *J. Phys. A* **39**, 157 (2006).
- [146] S. P. Kim, *J. Kor. Phys. Soc.* **49**, 464 (2006).
- [147] G. Lu, W. Hai and L. Cai, *Phys. Lett. A* **357**, 181, (2006).
- [148] M. Maamache, Y. Saâdi, J. R. Choi and K. H. Yeon, *J. Kor. Phys. Soc.* **56** (4), 1063~1067 (2010).
- [149] L. Krache, M. Maamache, and Y. Saâdi, *Int. J. Theor. Phys.* **49** (4), 936-942 (2010).
- [150] G. Pöschl and E. Teller, *Z. Phys.* **83**, 143 (1933).

Adiabatic Theorem and Generalized Geometrical Phase in the Case of Continuous Spectra

M. Maamache and Y. Saadi

Lab PQSD, Faculté des Sciences, Université Ferhat Abbas de Sétif, Sétif 19000 Algeria

(Received 7 April 2008; published 9 October 2008)

By defining “a virtual gap” for the continuous spectrum through the notion of eigendifferential (Weyl’s packet) and using the differential projector operator, we present a rigorous demonstration and discussion of the quantum adiabatic theorem for systems having a nondegenerate continuous spectrum. An explicit formula for a generalized geometrical phase is derived in terms of the eigenstates of the Hamiltonian. Examples are given for illustration.

DOI: [10.1103/PhysRevLett.101.150407](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.150407)

PACS numbers: 03.65.Ca, 03.65.Nk, 03.65.Ta, 03.65.Vf

The adiabatic theorem (AT) is one of the basic results in quantum theory [1]. It is concerned with quantum systems described by an explicitly, but slowly, time-dependent Hamiltonian. This AT concerns states $|\psi(t)\rangle$ satisfying the time-dependent Schrödinger equation

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

and asserts that if a quantum system with a time-dependent nondegenerate Hamiltonian $H(t)$ is initially in the n th eigenstates of $H(0)$, and if $H(t)$ evolves slowly enough, then the state at time t will remain in the n th instantaneous eigenstates of $H(t)$ up to a multiplicative phase factor $\phi_n(t)$. There has been a sudden regain of interest in the AT for itself among physicists when in 1984, M. V. Berry [2] pointed out that if it was applied to Hamiltonians, whose parameters vary slowly in time and has been confined to discrete spectrum, satisfying $H(t_1) = H(t_2)$, it could generate a geometrical phase (GP) factor $e^{i\gamma_n^B}$. This is a part from the familiar dynamical phase factor $e^{-(i/\hbar) \int E_n(t) dt}$ associated with the time evolution of the state being so transported with instantaneous eigenenergy $E_n(t)$, depending only on the curve C which has been followed in the parameters space. And more recently, the AT has renewed its importance in the context of quantum control [3], for example, concerning adiabatic passage between atomic energy levels, as well as for adiabatic quantum computation [4].

There are several points of view for a discussion of the quantum AT [5–7]; each one offers interesting insight. Let us simply recall here that works [1,5,6] have led to a formulation of the AT under the usual gap assumption $g_{nm}(t) = E_n(t) - E_m(t)$, between level n and m . One may then state that a general validity condition for adiabatic behavior is well controlled as follows: the larger is the quantity $\min_{0 \leq t \leq T, m} |g_{nm}(t)|$, the smaller will be the transition probability.

Despite the existence of extensive literature on rigorous proofs of estimates needed to justify the adiabatic approximation (AA) [1,6–8], doubts have been raised about its validity [9] leading to confusion about the precise condition needed to use it [10]. In part, this is because some

papers emphasize different aspects, such as the asymptotic expansion, the replacement of the requirement of nondegenerate ground state by a spectral projection separated from the rest of the spectrum, dependence of first order estimates on the spectral gap, and even extensions to systems without a gap. AT without gap conditions is known to be true [7]; however, in general, no estimates on the error terms are available. J. E. Avron and A. Elgart have shown in Ref.[7] that the AT holds provided the spectral projection is of finite rank independently of any spectral considerations, and that it is much more appropriate for the systems without a gap condition and which have a discrete origin. A similar result was proven in [11] for discrete Hamiltonian when the set of eigenvalues crossings is of measure zero in time. The limitation of these approaches is that, in general, no estimate can be made on the rate at which the adiabatic regime is attained [7].

In this Letter, (i) we present a straightforward, yet rigorous, proof of the AT and AA for systems whose Hamiltonian has a completely continuous spectrum (CS) supposed nondegenerated for reasons of simplicity and which checks a certain number of conditions which will be given later on, (ii) we give a generalization of the GP, (iii) we apply this theory to two physical examples.

In the case of CS we cannot numerate eigenvalues and eigenfunctions, they are characterized by the value of the physical quantity in the corresponding state. Although the eigenfunctions $\varphi(k; t)$ of the operators with CS cannot be normalized in the usual manner as is done for the functions of discrete spectra, one can construct with the $\varphi(k; t)$ new quantities—theWeyl’s *eigendifferentials* (*wave packets*)—[12] which possess the properties of the eigenfunction of discrete spectrum. The eigendifferentials are defined as

$$|\delta\varphi(k; t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; t)\rangle dk'. \quad (2)$$

They divide up the CS of the eigenvalues into finite but sufficiently small discrete regions of size δk . The eigendifferential (2) is a special wave packet which has only a finite extension in space; hence, it vanishes at infinity and therefore can be seen in analogy to bound states. Furthermore, because the $\delta\varphi$ have finite spatial extension,

they can be normalized. Then in the limit $\delta k \rightarrow 0$, a meaningful normalization of the function φ themselves follows: the normalization on δ functions.

For δk , a small connected range of values of the parameter k (this corresponds to a group of “neighboring” states), the operator

$$\delta P(k; t) = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k'; t)\rangle\langle\varphi(k'; t)| dk' \quad (3)$$

represents the projector (the differential projection operator) onto those states contained in the interval and characterized by the values of the parameter k within the range of values δk . The action of $\delta P(k; t)$ on a wave function $|\psi(t)\rangle$ causes thus the projection of the wave function onto the domain of states $\varphi(k; t)$ which is characterized by k values within the δk interval. Before proceeding further, we give the statement of the AT.

Let us call $U_T(s)$ the evolution operator where s is the fictitious time and T is the time interval during which the evolution of the system takes place and where the slowly time-dependent Hamiltonian $H(s) = \int E(k, s)|\varphi(k, s)\rangle\langle\varphi(k, s)| dk$, $0 \leq s \leq 1$, has a purely CS $E(k, s)$.

If the following conditions are fulfilled (i) As mentioned earlier, the CS is divided into discrete regions of size δk , we must define a gap of energy for the CS; in other words, the size δk is chosen so that $|E(k; s) - E(k'; s)| \gg \frac{1}{T}$, $\forall k' \notin [k, k + \delta k]$. (ii) We assume that the eigenvalues are piecewise differentiable in the parameter s , and there is no level crossing throughout the transition, i.e., $E(k'; s) \neq E(k''; s)/s \in [0, 1]$, $k' \in [k, k + \delta k]$, $k'' \notin [k, k + \delta k]$. (iii) The derivatives $\frac{\partial}{\partial s} \delta P(k; s)$ and $\frac{\partial^2}{\partial s^2} \delta P(k; s)$ are well defined and continuous in the interval $0 \leq s \leq 1$.

Under these conditions, it is possible to prove the AT:

Theorem.—If the quantum system with time-dependent Hamiltonian having a nondegenerate CS is initially in an eigenstate $|\varphi(k, 0)\rangle$ of $H(0)$ and if $H(s)$ evolves slowly enough, then the state of the system at any time s will remain in the interval $[k, k + \delta k]$.

The AT can be formally written, at the first order, in terms of the evolution operator as

$$\forall k: \lim_{T \rightarrow \infty} U(s) \delta P(k; 0) = \delta P(k; s) \lim_{T \rightarrow \infty} U(s) + O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (4)$$

Notice that if, initially, the system is in the state $|\varphi(k, 0)\rangle$ so that $H(0)|\varphi(k, 0)\rangle = E(k, 0)|\varphi(k, 0)\rangle$ and expanding an arbitrary state vector on the basis of the instantaneous quasi-eigenfunction, then in the limit $T \rightarrow \infty$ (4) implies that the state

$$|\psi(s)\rangle = U(s)|\varphi(k; 0)\rangle = \int_k^{k+\delta k} C_{k'}(s)|\varphi(k'; s)\rangle dk', \quad (5)$$

belongs to the subspace generated by the states $|\varphi(k; s)\rangle$ pertaining to the interval $[k, k + \delta k]$.

Proof.—The demonstration that we present follows the same approach developed in Ref. [12] for the discrete case, and it consists of three steps: first, we change to the evolution picture where the Hamiltonian has time-

dependent spectral projections; i.e., we go over to a time-dependent reference frame following the axes which diagonalize $H(s)$. In this picture, the time evolution generator contains an immediately integrable contribution, which we eliminate by going over to a second picture, and finally, one shows that the remaining evolution operator differs from identity by terms $O(1/T)$. We introduce a unitary transformation $U_T(s) = A(s)\Phi_T(s)W(s)$ where the unitary operator $A(s)$ has the property $\delta P(k, s) = A(s)\delta P(k, 0)A^\dagger(s)$ ($\forall k \in \mathbb{R}$) and is completely defined by the initial condition $A(0) = I$ and the differential equation $i\hbar \partial A(s)/\partial s = K(s)A(s)$. The appropriate Hermitian operator $K(s)$ obeys the following commutation relation,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k, s) = [K(s), \delta P(k, s)], \quad (6)$$

and is determined without ambiguity if we add the additional condition $\langle\varphi(k; t)|K(t)|\varphi(k'; t)\rangle = 0$, ($\forall k' \in [k, k + \delta k]$). This gives

$$K(t) = i\hbar \int [1 - \delta P(k; t)] |\varphi(k; t)\rangle\langle\varphi(k; t)| dk. \quad (7)$$

The unitary transformation $A^\dagger(s)$ carries the vectors and operators of the Schrödinger “representation” over the vectors and operators of a new “representation,” the “rotating axis representation.” The observable $H(s)$ is transformed into $H^{(A)}(s) = A^\dagger(s)H(s)A(s)$ giving $H^{(A)}(s) = \int E(k, s)|\varphi(k, 0)\rangle\langle\varphi(k, 0)| dk$. Similarly, $K(s)$ becomes $K^{(A)}(s) = A^\dagger(s)K(s)A(s)$. The operator $\Phi_T(s)$ may be written, with the initial condition $\Phi_T(0) = I$, as

$$\Phi_T(s) = \int e^{-(i/\hbar)T\alpha(k, s)} |\varphi(k, 0)\rangle\langle\varphi(k, 0)| dk, \quad (8)$$

where $\alpha(k, s) = \int_0^s E(k, s') ds'$. The demonstration of (4) is equivalent to showing that $[W(s), \delta P(k, 0)] = 0$. To prove this result, we insert $U_T(s)$ in the evolution equation $i\hbar \partial U_T(s)/\partial s = TH(s)U_T(s)$. This gives the equation satisfied by the unitary operator W in its integral form

$$W(s) = I + \frac{i}{\hbar} F(s)W(s) + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^s F(s') \bar{K}(s') W(s') ds', \quad (9)$$

taking into account the equation $i\hbar \partial W(s)/\partial s = \bar{K}(s)W(s)$ and $F(s) = \int_0^s \bar{K}(s') ds'$ where $\bar{K}(s) = \Phi_T^\dagger(s)K^{(A)}(s)\Phi_T(s)$. We are going to show that $F(s)$ is a sum of oscillating functions whose frequencies increase indefinitely with T , and consequently, the two last terms on the right-hand side of the equation (9) tend to zero when $T \rightarrow \infty$. Any operator [and in particular $F(s)$] admits the following decomposition $F(s) = \iint F(k, k', s) dk dk' = \int_0^s P(k, 0) \bar{K}(s') P(k', 0) ds'$, where $P(k, 0) = I$ is the projector. Using (8), we obtain

$$F(k, k', s) = \int_0^s \exp\left[\frac{i}{\hbar} T [\alpha(k, s') - \alpha(k', s')]\right] \times K^{(A)}(k, k', s') ds' \quad (10)$$

where $k' \notin [k, k + \delta k]$, because for $k' \in [k, k + \delta k]$, the $F(k, k', s)$ vanish (see the condition stated above). $K^{(A)}(k, k', s')$ is a continuous function of s independent of T . The phase of the exponential, however, does depend on

T , and $F(k, k', s)$ is therefore of the form $\int_0^s e^{iT\alpha(s')/\hbar} f(s') ds'$, where f is a continuous function and α is a continuous monotonic function. Such an integral is known to go to zero when $T \rightarrow \infty$. In conclusion, when $T \rightarrow \infty$ we have $F(s) = O(1/T)$. Since the two last terms in Eq. (9) contain the factor $F(s)$, then for $T \rightarrow \infty$ and from $U_T(s) = A(s)\Phi_T(s)W(s)$, we obtain

$$U_T(s) \simeq A(s)\Phi_T(s) \left[I + O\left(\frac{1}{T}\right) \right]. \quad (11)$$

Finally, (8) implies $\Phi_T(s)\delta P(k, 0) = \delta P(k, 0)\Phi_T(s)$ and hence $A(s)\Phi_T(s)\delta P(k, 0) = A(s)\delta P(k, 0)\Phi_T(s) = \delta P(k, s) \times A(s)\Phi_T(s)$. This concludes the proof of the AT (4). ■

If T is sufficiently large, we can, in first approximation, replace $U(t_1, t_0)$ by its asymptotic form:

$$U(t_1, t_0) = U_T(1) \simeq A(1)\Phi_T(1). \quad (12)$$

This is called the AA. If the initial normalized state is $|\varphi(k_0, 0)\rangle$, then under this approximation, $U(t_1, t_0)|\varphi(k_0, 0)\rangle \approx A(1)\Phi_T(1)|\varphi(k_0, 0)\rangle$. To determine

$$\eta \approx \frac{1}{\hbar^2} \int_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} \left| i\hbar \int_{t_0}^{t_1} e^{(i/\hbar) \int_{t_0}^{t'} [E(k_0, t') - E(k, t')] dt'} \langle \varphi(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle dt \right|^2 dk. \quad (14)$$

The condition $\eta \ll 1$ is, therefore, in most cases, certainly satisfied if

$$\begin{aligned} & \max_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} |\langle \varphi(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle| \\ & \ll \min_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} |E(k_0, t') - E(k, t')|, \quad \forall t \in [t_0, t_1], \end{aligned} \quad (15)$$

with max and min taken over all $k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]$. Condition (15) may be taken as a criterion for the validity of the AA in the case of a CS. This estimate of the AA could not be derived if using the Avron-Elgart's approach [7] as mentioned earlier.

The question arises: is there a GP for a CS? This case was raised for the first time by R. G. Newton [13] who looks at the S matrix as a GP factor. Newton introduced what may be called the noninteraction picture to get the GP factor in the CS. G. Ghosh [13] extends the AA to the continuous spectra like an ansatz.

In order to derive the GP for the nondegenerate CS, we insert (5) in the Schrödinger equation (1) and we multiply the resulting equation by $\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi(k''; t) | dk''$, since k can sweep all the possible values and the intervals δk should be small ($\delta k \rightarrow 0$) the equality between integrals implies the equality between integrands, this yields

$$\begin{aligned} C_k(t) &= \delta(k' - k) \\ & \times e^{-\int_{t_0}^t [(i/\hbar)E(k'; t') + \int_{-\infty}^{+\infty} dk'' \langle \varphi(k''; t') | (\partial/\partial t') \varphi(k'; t') \rangle] dt'}; \end{aligned} \quad (16)$$

hence, the adiabatic solution of the time-dependent Schrödinger equation (1) is

$$|\psi(k, t)\rangle = e^{(i/\hbar)[- \gamma^D(k; t) + \gamma^G(k; t)]} |\varphi(k; t)\rangle, \quad (17)$$

the validity of the AA for a given process, we can estimate the error by computing the probability $\eta = \langle \varphi(k_0, 0) | W^+(1) Q_0 W(1) | \varphi(k_0, 0) \rangle$ of finding the system at time t_1 in a state different from $A(1)\Phi_T(1)|\varphi(k_0, 0)\rangle$, where $Q_0 = I - \delta P(k_0, 0)$. Solving (9) iteratively and keeping only the first order term, we find

$$\eta \approx \frac{1}{\hbar^2} \int_{k \notin [k_0, k_0 + \delta k_0]} |\langle \varphi(k_0, 0) | F(1) | \varphi(k, 0) \rangle|^2 dk. \quad (13)$$

Hence, the AA is applicable when $\eta \ll 1$. This condition is not easy to verify in practice because in general we do not have enough explicit information about the operator $F(1)$. A different way of writing $\eta \ll 1$, more amenable to interpretation, is to define a normalized time through the variable transformation $t = t_0 + sT$ ($0 \leq s \leq 1$), and the initial normalized state $|\varphi(k_0, t_0)\rangle$ of $H(t_0)$ with the eigenvalue $E(k_0, t_0)$. Then, using (7) and (10) and performing the change $s \rightarrow t$ in (13) yields

where $\gamma^D(k; t)$ is the familiar dynamical phase factor, and

$$\gamma^G(k; t) = \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi(k'; t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} |\varphi(k; t')\rangle dt' dk', \quad (18)$$

is the generalized GP which embodies another central result of this Letter. Note that all properties of the GP in discrete case are fulfilled by the generalized GP $\gamma^G(k; t)$ (18) for the continuous case.

We now want to analyze the nature of the phase (18) through examples. Our first case is the Dirac equation in a time-dependent electromagnetic field where the Hermitian time-dependent Dirac Hamiltonian defined in a 4-dimensional Hilbert space spanned by the two-dimensional basis state $|1\rangle$ and $|2\rangle$ can be written

$$\begin{aligned} H_D(t) &= m(t)c^2[|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|] + c\sigma^3[p - f(t)]|1\rangle\langle 2| \\ & + c\sigma^3[p - f^*(t)]|2\rangle\langle 1| \end{aligned} \quad (19)$$

p is the momentum operator, the mass $m(t)$ and $f(t)$ are periodic slow functions of time, σ^3 is the 2×2 standard Pauli matrix. At any time t , the instantaneous eigenstates (normalized to δ function) of the Hamiltonian (19) are

$$\begin{aligned} |\varphi^\pm(z, k; t)\rangle &= \left\{ \frac{c\sigma^3 g(k; t)}{\sqrt{[m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k; t)]^2 + |g(k; t)|^2 c^2}} |1\rangle \right. \\ & \left. + \frac{m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k; t)}{\sqrt{[m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k; t)]^2 + |g(k; t)|^2 c^2}} |2\rangle \right\} \\ & \times \frac{e^{(i/\hbar)kz}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \end{aligned} \quad (20)$$

and correspond to the eigenvalues $\pm \hbar\omega(k, t)$ where $\hbar\omega(k; t) = c\sqrt{m^2(t)c^2 + |g(k; t)|^2}$ and $g(k; t) = f(t) - k$. Substituting (20) in Eq. (18) and using of the following

representation of the adiabatic parameters $[\text{Re}f(t) - k]c = \hbar\omega \sin\theta \cos\varphi$, $\text{Im}f(t)c = \hbar\omega \sin\theta \sin\varphi$ and $m(t)c^2 = \hbar\omega \cos\theta$; ω , θ , and φ are now chosen as time-dependent adiabatic quantities, we find that the generalized GP is nothing but the solid angle $\gamma^G(k; C) = -\frac{\hbar}{2}\Omega$ subtended by the circuit C when seen from $(k, 0, 0)$ in $[\text{Re}f(t), \text{Im}f(t), m(t)c]$ space.

Our next example is the geometrical aspect of the S matrix: A very general way of looking at the S matrix as a GP factor has been implicitly provided by Newton [13], where the expression for GP looks strikingly similar to the equation of the wave operator in the interaction picture. This leads Newton to conclude that the S matrix appears in geometric phase as an expression of the adiabatic switching on and off of the interaction. Here, we show explicitly that, in the case of an elastic scattering, the generalized GP (18) is nothing but the diagonal element of the S matrix.

The state vector $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ of the given physical system is assumed to satisfy the Schrödinger equation (1), $U(t, t_0)$ being the unitary evolution operator associated to the Hamiltonian operator $H(t)$. In order to solve Eq. (1) under the adiabatic assumption, we assume that the Hamiltonian can be split into two parts $H(t) = H_0 + V(t)$ so that H_0 represents the noninteracting particles Hamiltonian. In other words, H_0 represents the free Hamiltonian operator whose eigenstates in the CS are defined as $H_0|\varphi^F(k)\rangle = E(k)|\varphi^F(k)\rangle$. For the present, we have primarily elastic scattering in mind, and we may think of $V(t)$ as the time-dependent potential of interaction. We assume that $V(t)$ varies slowly in time with $V(t) \neq 0$ for $t_0 < t < t_1$.

In scattering problems, we are interested in calculating transition amplitudes between states $|\varphi^F(k)\rangle$ (F stands for free evolution). The system initially in the state $|\psi(-\infty)\rangle = |\varphi^F(k_0)\rangle$ evolves freely towards the interaction region under the action of the free Hamiltonian H_0 . Expansion of the adiabatic evolved state $|\psi(t)\rangle$ (17) on the basis of the instantaneous eigenstates $|\varphi^F(k)\rangle$ of H_0 leads to the matrix elements of the evolution operator $U(t, t_0)$ in the basis $\{|\varphi^F(k)\rangle\}$

$$\begin{aligned} \langle \varphi^F(k) | U(t, t_0) | \varphi^F(k_0) \rangle \\ = e^{(i/\hbar)[- \gamma^D(k_0; t) + \gamma^G(k_0; t)]} \langle \varphi^F(k) | \varphi(k_0; t) \rangle. \end{aligned} \quad (21)$$

In the interaction picture $\tilde{U}(t, t_0) = e^{i\hbar^{-1}(t-t_0)H_0} U(t, t_0)$, the corresponding matrix elements of \tilde{U} between the eigenstates of the unperturbed Hamiltonian H_0 satisfy

$$\begin{aligned} \langle \varphi^F(k) | \tilde{U}(t, t_0) | \varphi^F(k_0) \rangle \\ = e^{(i/\hbar)[- \gamma^D(k_0; t) + \int_{t_0}^t E(k)dt' + \gamma^G(k_0; t)]} \langle \varphi^F(k) | \varphi(k_0; t) \rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

As expected, the initial ($t \leq t_0$) and final ($t \geq t_1$) eigenstates of the free Hamiltonian H_0 are identical, i.e., $|\varphi^F(k_0, t \geq t_1)\rangle = |\varphi^F(k)\rangle$. By pushing the initial time into the distant past, i.e., $t_0 \rightarrow -\infty$, similarly $t \rightarrow \infty$ signals that the scattering process is complete, we obtain the scattering matrix or S matrix

$$\langle \varphi^F(k) | S | \varphi^F(k_0) \rangle = \delta(k - k_0) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k_0; +\infty)\right]. \quad (23)$$

On the basis of this comparison, we may conclude that after the Hamiltonian completes an adiabatic circuit from H_0 via $H(t)$ back to H_0 , the state which initially was given by $|\varphi^F(k)\rangle$ has gone over into a new state that differs from it by a multiplicative factor S_k which is the eigenvalue of the unitary S matrix; it is related to the generalized GP (18) by $S_k = \exp[\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k; +\infty)]$.

-
- [1] M. Born and V. Fock, Z. Phys. **51**, 165 (1928); T. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. **5**, 435 (1950).
 - [2] M. V. Berry, Proc. R. Soc. A **392**, 45 (1984).
 - [3] J. Oreg *et al.*, Phys. Rev. A **29**, 690 (1984); S. Schieman *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 3637 (1993); P. Pillet *et al.*, Phys. Rev. A **48**, 845 (1993).
 - [4] E. Farhi *et al.*, arXiv:quant-ph/0001106; A. M. Childs *et al.*, Phys. Rev. A **65**, 012322 (2002).
 - [5] A. Lenard, Ann. Phys. (N.Y.) **6**, 261 (1959); L. M. Garrido, J. Math. Phys. (N.Y.) **5**, 355 (1964); S. J. Sancho, Proc. Phys. Soc. London **89**, 1 (1966).
 - [6] G. Nenciu, J. Phys. A **13**, L15 (1980); J. E. Avron *et al.*, Commun. Math. Phys. **110**, 33 (1987).
 - [7] J. E. Avron and A. Elgart, Commun. Math. Phys. **203**, 445 (1999).
 - [8] A. Joye and C. E. Pfister, J. Phys. A **24**, 753 (1991); S. Jansen *et al.*, J. Math. Phys. (N.Y.) **48**, 102111 (2007).
 - [9] K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, Phys. Rev. Lett. **93**, 160408 (2004); Z. Wu and H. Yang, Phys. Rev. A **72**, 012114 (2005); Solomon Duki *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 128901 (2006); Jie Ma *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 128902 (2006); K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, Phys. Rev. Lett. **97**, 128903 (2006).
 - [10] A. Ambainis and O. Regev, arXiv:quant-ph/0411152; M. S. Sarandy *et al.*, Quant. Info. Proc. **3**, 331 (2004); D. M. Tong *et al.*, Phys. Rev. Lett. **95**, 110407 (2005); **98**, 150402 (2007); R. Mackenzie *et al.*, Phys. Rev. A **73**, 042104 (2006).
 - [11] F. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems*, Lec. Notes Math. Vol. 1687 (Springer, New York, 1998).
 - [12] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1962).
 - [13] R. G. Newton, Phys. Rev. Lett. **72**, 954 (1994); G. Ghosh, Phys. Lett. A **210**, 40 (1996).

Quantal phase factors accompanying adiabatic changes in the case of continuous spectra

M. Maamache and Y. Saadi

Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques, Faculté des Sciences, Université Ferhat Abbas de Sétif, Sétif 19000, Algeria

(Received 27 August 2008; published 12 November 2008)

By defining “a virtual gap” for the continuous spectrum through the notion of eigendifferential (Weyl’s packet) and using the differential projector operator, we present a rigorous demonstration and discussion of the quantum adiabatic theorem and the validity condition of the adiabatic approximation for systems having a nondegenerate continuous spectrum. We show that a quantal system in an eigenstate, of operators with a continuous nondegenerate eigenvalue spectrum, slowly transported around a closed curve C by varying parameters in its Hamiltonian, will acquire a generalized geometrical phase factor where an explicit formula is derived in terms of the eigenstates of the Hamiltonian. Examples are given for illustration.

DOI: 10.1103/PhysRevA.78.052109

PACS number(s): 03.65.Ca, 03.65.Ta, 03.65.Vf, 03.65.Nk

I. INTRODUCTION

The adiabatic theorem is one of the basic results in quantum theory [1,2]. It is concerned with quantum systems described by an explicitly, but slowly, time-dependent Hamiltonian. This adiabatic theorem concerns states $|\psi(t)\rangle$ satisfying the time-dependent Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(\vec{X}(t)) |\psi(t)\rangle, \quad (1)$$

and asserts that if a quantum system with a time-dependent nondegenerate Hamiltonian $H(\vec{X}(t))$ is initially in the n th eigenstates of $H(\vec{X}(0))$, and if $H(\vec{X}(t))$ evolves slowly enough, then the state at time t will remain in the n th instantaneous eigenstates of $H(\vec{X}(t))$ up to a multiplicative phase factor $\phi_n(t)$. The explicit time dependence of the Hamiltonian stems in some applications from the time dependence of external parameters such as electric field, which is slowly turned on. However, often the slowly varying parameters come from an idealization of the coupling to another quantum system. The idealization consists in prescribing the time-dependent configuration of the other system in the full quantum system Hamiltonian. There are several points of view for a discussion of the quantum adiabatic theorem; each one offers interesting insight. As Kato [2] has pointed out, the contents of the adiabatic theorem embody two parts: first, the existence of a virtual change of the system, which may be called an adiabatic transformation, and, second, the dynamical transformation of the system goes over to an adiabatic transformation in the limit when the change of the Hamiltonian is infinitely slow. The adiabatic theorem proof given by Born and Fock [1], although very general, is still restricted by the assumption of considering the purely discrete and nondegenerate Hamiltonian’s spectrum, except for accidental degeneracy caused by crossing. These limitations are rather artificial from the physical point of view and should be removed from Kato’s derivation of the adiabatic theorem. Several authors [3] had formally extended the Kato’s results on the approximate validity of the adiabatic theorem when the time T , during which the approximation takes place, is large but finite. Nenciu [4] demonstrated the adiabatic theo-

rem for bounded Hamiltonians. Later, Avron and Elgart [5] showed that the adiabatic theorem holds for unbounded Hamiltonians as well and applied it to deal with the quantum Hall effect.

Let us simply recall here that the works following that of Born and Fock [1] by Kato [2], Garrido [3], Nenciu [4], and Avron *et al.* [4] have led to a formulation of the adiabatic theorem under the usual gap assumption $g_{nm}(t) = E_n(t) - E_m(t)$, between levels n and m . One may then state that a general validity condition for adiabatic behavior is well controlled as follows: the larger is the quantity $\min_{0 \leq t \leq T, m} |g_{nm}(t)|$ the smaller will be the transition probability.

Despite the existence of extensive literature on rigorous proofs of estimates needed to justify the adiabatic approximation [2,4–6], doubts have been raised about its validity [7] leading to confusion about the precise condition needed to use it [8]. In part, this is because some papers emphasize different aspects, such as the asymptotic expansion, the replacement of the requirement of nondegenerate ground state by a spectral projection separated from the rest of the spectrum, dependence of first order estimates on the spectral gap, and even extensions to systems without a gap.

Adiabatic theorem without gap conditions is known to be true [5], however, in general, no estimates on the error terms are available. Avron and Elgart have shown in Ref. [5] that the adiabatic theorem holds provided the spectral projection is of finite rank independently of any spectral considerations. A similar result was proven by Bornemann [9] for discrete Hamiltonian when the set of eigenvalue crossings is of measure zero in time. The limitation of these approaches is that, in general, no estimate can be made on the rate at which the adiabatic regime is attained [5].

The gap condition is generally associated to spectral stabilities. Consequently, the situation where the gap does not exist will lead to spectral instabilities. Thus it is difficult to establish smooth spectral projections, which is a necessary condition for the validity of the adiabatic theorem in the practical applications. In fact, the generalized adiabatic theorem, according to Avron and Elgart’s approach [5], is much more appropriate for the systems without a gap condition and which have a discrete origin.

There has been a sudden regain of interest in the adiabatic theorem for itself among physicists when in 1984, Berry [10] pointed out that if it was applied to Hamiltonians confined to discrete spectrum, whose parameters vary slowly in time, satisfying $H(\vec{X}(t_1))=H(\vec{X}(t_2))$, it could generate a geometrical phase factor e^{γ_B} . This is a part from the familiar dynamical phase factor $e^{-(i/\hbar)\int E_n(t)dt}$ associated with the time evolution of the state being so transported with instantaneous eigenenergy $E_n(t)$, depending only on the curve C , which has been followed in the parameter space. The question arises: Is there a geometrical phase for a continuous spectrum? This case was raised for the first time by Newton [13] who looks at the S matrix as a geometrical phase factor. Newton [13] introduced what may be called the noninteraction picture to get the geometric phase factor in the continuous spectrum. In order to reinterpret the usual scattering phase shift as an adiabatic phase in the spirit of the original investigation of Berry, Ghosh [14] extends the adiabatic approximation to the continuous spectra such as an ansatz and confines himself to one dimensional scattering with negligible reflection. Because the states are not normalizable and gauge invariance is lost, Ghosh [14] showed that the phase shift can be expanded in a series of reparametrization invariant terms.

And more recently, the adiabatic theorem has renewed its importance in the context of quantum control [11], for example, concerning adiabatic passage between atomic energy levels, as well as for adiabatic quantum computation [12].

In this paper (i) we present a straightforward, yet rigorous, proof of the adiabatic theorem and adiabatic approximation for systems whose Hamiltonians have a completely continuous spectrum supposed nondegenerated for reasons of simplicity and which check a certain number of conditions, which will be given later on; (ii) we give a generalization of the geometrical phase; and (iii) we apply this theory to three physical examples: a Dirac particle in a time-dependent electromagnetic field, a relation between the geometrical phase and the S matrix, and the unidimensional reflectionless potential.

The state $|\psi(t)\rangle$ of the system evolves according to the Schrödinger equation (1). At any instant, the natural basis consists of eigenstates $|\varphi(k,t)\rangle$ (assumed continuous) of $H(\vec{X}(t))$, that satisfy

$$H(\vec{X}(t))|\varphi(k,t)\rangle = E(k,t)|\varphi(k,t)\rangle, \quad (2)$$

with energies $E(k,t)$.

In the case of continuous spectrum we cannot numerate eigenvalues and eigenfunctions; they are characterized by the value of the physical quantity in the corresponding state. Although the eigenfunctions $\varphi(k,t)$ of the operators with continuous spectra cannot be normalized in the usual manner as is done for the functions of discrete spectra, one can construct with the $\varphi(k,t)$ new quantities—the Weyl *eigendifferentials* (*wave packets*)—[15] which possess the properties of the eigenfunction of discrete spectrum. The eigendifferentials are defined by the equation

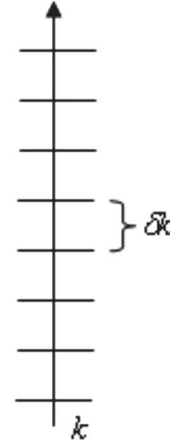


FIG. 1. Decomposition of the continuous spectrum.

$$|\delta\varphi(k,t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k',t)\rangle dk'. \quad (3)$$

They divide up the continuous spectrum of the eigenvalues into finite but sufficiently small discrete regions of size δk (see Fig. 1).

The eigendifferential (3) is a special wave packet, which has only a finite extension in space; hence, it vanishes at infinity and therefore can be seen in analogy to bound states. Furthermore, because the $\delta\varphi$ have finite spatial extension, they can be normalized. Then in the limit $\delta k \rightarrow 0$, a meaningful normalization of the function φ themselves follows: the normalization on δ functions.

For δk , a small connected range of value of the parameter k [this corresponds to a group of “neighboring” states; see Fig. 1], the operator

$$\delta P(k,t) = \int_k^{k+\delta k} |\varphi(k',t)\rangle \langle \varphi(k',t)| dk' \quad (4)$$

represents the projector (the differential projection operator [16]) onto those states contained in the interval and characterized by the values of the parameter k within the range of values δk . The action of $\delta P(k,t)$ on a wave function $|\psi(t)\rangle$ is defined by

$$\delta P(k,t)|\psi(t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} C(k',t)|\varphi(k',t)\rangle dk'. \quad (5)$$

The application of the differential projection operator $\delta P(k,t)$ causes thus the projection of the wave function onto the domain of states $\varphi(k,t)$, which is characterized by k values within the δk interval. Before proceeding further, we give the statement of the adiabatic theorem.

II. GENERALIZED ADIABATIC THEOREM

Let us call $U_T(s)$ the evolution operator, where s is the fictitious time and T is the time interval during which the evolution of the system takes place,

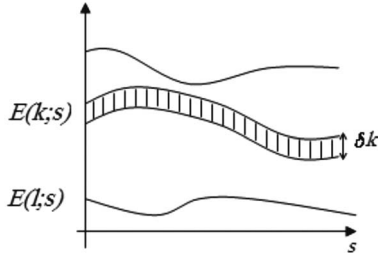


FIG. 2. Evolution of a range of energy of width δk as a function of time.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U_T(s) = TH(s)U_T(s), \quad (6)$$

where the slowly time-dependent Hamiltonian $H(s) = \int E(k, s) |\varphi(k, s)\rangle \langle \varphi(k, s)| dk$, $0 \leq s \leq 1$, has a purely continuous spectrum $E(k, s)$.

If the following conditions are fulfilled:

(i) As mentioned earlier (see Fig. 1) the continuous spectrum is divided into discrete regions of size δk . We must define or create a gap of energy for the continuous spectrum; in other words, the size δk is chosen so that

$$|E(k, s) - E(k', s)| \geq \frac{1}{T}, \quad \forall k' \in [k, k + \delta k]. \quad (7)$$

(ii) We assume that the eigenvalues are piecewise differentiable in the parameter s , and there is no level crossing (see Fig. 2) throughout the transition, i.e.,

$$E(k', s) \neq E(k'', s), \quad s \in [0, 1],$$

$$k' \in [k, k + \delta k], \quad k'' \in [k, k + \delta k]. \quad (8)$$

(iii) The derivatives $\frac{\partial}{\partial s} \delta P(k, s)$ and $\frac{\partial^2}{\partial s^2} \delta P(k, s)$ are well defined and continuous in the interval $0 \leq s \leq 1$.

Under these conditions it is possible to prove the adiabatic theorem:

Theorem. If the quantum system with time-dependent Hamiltonian having a nondegenerate continuous spectrum is initially in an eigenstate $|\varphi(k, 0)\rangle$ of $H(0)$ and if $H(s)$ evolves slowly enough, then the state of the system at any time s will remain in the interval $[k, k + \delta k]$.

The adiabatic theorem can be formally written, at the first order, in terms of the evolution operator as

$$\lim_{T \rightarrow \infty} U(s) \delta P(k, 0) = \delta P(k, s) \lim_{T \rightarrow \infty} U(s) + O\left(\frac{1}{T}\right) \quad \forall k. \quad (9)$$

Notice that if, initially, the system is in the state $|\varphi(k, 0)\rangle$ so that $H(0)|\varphi(k, 0)\rangle = E(k, 0)|\varphi(k, 0)\rangle$ and expanding an arbitrary state vector on the basis of the instantaneous quasi-eigenfunction, then Eq. (9) implies that

$$\lim_{T \rightarrow \infty} U(s) |\varphi(k, 0)\rangle = \delta P(k, s) \lim_{T \rightarrow \infty} U(s) |\varphi(k, 0)\rangle, \quad (10)$$

and in the limit $T \rightarrow \infty$ the state

$$|\psi(k, s)\rangle = U(s) |\varphi(k, 0)\rangle = \int_k^{k+\delta k} C(k', s) |\varphi(k', s)\rangle dk' \quad (11)$$

belongs to the subspace generated by the states $|\varphi(k, s)\rangle$ pertaining to the interval $[k, k + \delta k]$.

Proof. The demonstration that we present follows the same approach developed in Ref. [16] for the discrete case and it consists of three steps: first we change to the evolution picture where the Hamiltonian has time-dependent spectral projections; i.e., we go over to a time-dependent reference frame following the axes which diagonalize $H(s)$. In this picture, the time evolution generator contains an immediately integrable contribution, which we eliminate by going over to a second picture, and finally one shows that the remaining evolution operator differs from identity by terms $O(1/T)$.

To do this, we introduce a unitary operator $A(s)$ having the property

$$\delta P(k, s) = A(s) \delta P(k, 0) A^\dagger(s) \quad \forall k \in \mathbb{R}. \quad (12)$$

It is completely defined by the initial condition $A(0) = I$ and the differential equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} A(s) = K(s) A(s). \quad (13)$$

The operator $K(s)$ obeys the following commutation relation:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \delta P(k, s) = [K(s), \delta P(k, s)], \quad (14)$$

and is determined without ambiguity if we add the following supplementary condition:

$$\langle \varphi(k, t) | K(t) | \varphi(k', t) \rangle = 0, \quad \forall k' \in [k, k + \delta k], \quad (15)$$

an equation that yields the following expression:

$$K(t) = i\hbar \int [1 - \delta P(k, t)] |\dot{\varphi}(k, t)\rangle \langle \varphi(k, t)| dk. \quad (16)$$

The unitary transformation $A^\dagger(s)$ carries the vectors and operators of the Schrödinger “representation” over the vectors and operators of a new representation, the “rotating axis representation.” The evolution operator in this new representation $U^{(A)}(s) = A^\dagger(s) U_T(s)$ verifies the following equation:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} U^{(A)}(s) = [TH^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)] U^{(A)}(s), \quad U^{(A)}(0) = I, \quad (17)$$

where

$$H^{(A)}(s) = A^\dagger(s) H(s) A(s) = \int E(k, s) |\varphi(k, 0)\rangle \langle \varphi(k, 0)| dk, \quad (18)$$

and

$$K^{(A)}(s) = A^+(s)K(s)A(s). \quad (19)$$

Since $H^{(A)}(s)$ and $K^{(A)}(s)$ are T independent, it is to be expected that in the $T \rightarrow \infty$ limit the first term of the right-hand side in Eq. (17) dominates. We can approximately solve such an equation in which we go over to a time-dependent reference frame following the axis which diagonalizes $H^{(A)}(s)$. We define $\Phi_T(s)$ via

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} \Phi_T(s) = TH^{(A)}(s)\Phi_T(s), \quad (20)$$

in which the solution may be written, with the initial condition $\Phi_T(0) = I$, as

$$\Phi_T(s) = \int \exp\left[-\frac{iT\alpha(k,s)}{\hbar}\right] |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k,0)| dk, \quad (21)$$

where $\alpha(k,s) = \int_0^s E(k,s') ds'$. If, as we will see immediately, $U^{(A)}(s)$ tends toward $\Phi_T(s)$ for large T , we will have approximately

$$U_T(s) \underset{T \rightarrow \infty}{\simeq} A(s)\Phi_T(s). \quad (22)$$

We go over to a second picture and we show that the remaining evolution operator differs from the identity by terms $O(\frac{1}{T})$. Thus, we change to a last picture with operator $W(s) \equiv \Phi_T^+(s)A^+(s)U_T(s)$, and ($-$) generator $\bar{K}(s) = \Phi_T^+(s)A^+(s)K(s)A(s)\Phi_T(s)$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial s} W(s) = \bar{K}(s)W(s), \quad W(0) = I, \quad (23)$$

equivalent to the integral equation

$$W(s) = I + \frac{i}{\hbar} \int_0^s \bar{K}(s')W(s') ds'. \quad (24)$$

Now, we prove that in the limit $T \rightarrow \infty$, $W(s) = I + O(\frac{1}{T})$. We begin by considering the operator $F(s) = \int_0^s \bar{K}(s') ds'$. Any operator [and, in particular, $F(s)$] admits the following decomposition:

$$\begin{aligned} F(s) &= \int \int F(k,k',s) dk dk' \\ &= \int_0^s \int \int \langle \varphi(k,0) | \bar{K}(s') | \varphi(k',0) \rangle | \varphi(k,0) \rangle \\ &\quad \times \langle \varphi(k',0) | dk dk' ds'. \end{aligned} \quad (25)$$

Using Eq. (21) we obtain

$$\begin{aligned} F(k,k',s) &= \int_0^s \exp\left[\frac{iT[\alpha(k,s') - \alpha(k',s')]}{\hbar}\right] K^{(A)} \\ &\quad \times (k,k',s') ds', \quad k' \notin [k, k + \delta k], \end{aligned} \quad (26)$$

an expression in which we have introduced the condition $k' \notin [k, k + \delta k]$ because, from Eq. (15), we deduce $F(k,k',s) = 0$ for $k' \in [k, k + \delta k]$.

Let $k' \notin [k, k + \delta k]$, since $K^{(A)}(k,k',s')$ is a continuous

function of s , our assumption implies that $\alpha(k,s') - \alpha(k',s')$ is a continuous nonvanishing monotonic function of s ; after integrating Eq. (26) by parts we obtain

$$\begin{aligned} F(k,k',s) &= \frac{\hbar}{iT} \left\{ \exp\left[\frac{iT[\alpha(k,s') - \alpha(k',s')]}{\hbar}\right] \right. \\ &\quad \times \left. \left[\frac{K^{(A)}(k,k',s')}{E(k,s') - E(k',s')} \right]_0^s \right. \\ &\quad \left. - \int_0^s \exp\left[\frac{iT[\alpha(k,s') - \alpha(k',s')]}{\hbar}\right] \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\frac{\partial}{\partial s'} K^{(A)}(k,k',s')}{E(k,s') - E(k',s')} ds' \right\}. \end{aligned} \quad (27)$$

Hence, according to the condition (7), $F(k,k',s)$ ($k' \notin [k, k + \delta k]$) asymptotically converges toward 0 as $\frac{1}{T}$. Summarizing, as $T \rightarrow \infty$ we have

$$F(s) = O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (28)$$

Using Eq. (23), integration by parts turns Eq. (24) into

$$W(s) = I + \frac{i}{\hbar} F(s)W(s) + \frac{1}{\hbar^2} \int_0^s F(s') \bar{K}(s)W(s') ds', \quad (29)$$

since the last two terms in this equation contain the factor $F(s)$, then for $T \rightarrow \infty$ and from $U_T(s) = A(s)\Phi_T(s)W(s)$ we obtain

$$U_T(s) \simeq A(s)\Phi_T(s) \left[I + O\left(\frac{1}{T}\right) \right]. \quad (30)$$

Finally, Eq. (21) implies $\Phi_T(s)\delta P(k,0) = \delta P(k,0)\Phi_T(s)$ and hence $A(s)\Phi_T(s)\delta P(k,0) = A(s)\delta P(k,0)\Phi_T(s) = \delta P(k,s)A(s)\Phi_T(s)$. This concludes the proof of the adiabatic theorem (9). ■

In the next section, we will show how to obtain the conditions in guaranteeing the validity of the adiabatic approximation.

III. ADIABATIC APPROXIMATION

If T is sufficiently large, we can, in first approximation, replace $U(t_1, t_0)$ by its asymptotic form as follows:

$$U(t_1, t_0) = U_T(1) \simeq A(1)\Phi_T(1). \quad (31)$$

This is called the adiabatic approximation. If the initial normalized state is $|\varphi(k_0, 0)\rangle$, under this approximation $U(t_1, t_0)|\varphi(k_0, 0)\rangle \simeq A(1)\Phi_T(1)|\varphi(k_0, 0)\rangle$. To determine the validity of the adiabatic approximation for a given process, we can estimate the error by computing the probability η of finding the system at time t_1 in a state different from $A(1)\Phi_T(1)|\varphi(k_0, 0)\rangle$

$$\eta = \langle \varphi(k_0, 0) | U^+(t_1, t_0) A(1) \Phi_T(1) Q_0 A^+(1) \Phi_T^+(1) \times U(t_1, t_0) | \varphi(k_0, 0) \rangle, \quad (32)$$

where $Q_0 = I - \delta P(k_0, 0)$. This quantity may be rewritten as

$$\eta = \langle \varphi(k_0, 0) | W^+(1) Q_0 W(1) | \varphi(k_0, 0) \rangle. \quad (33)$$

Solving Eq. (24) iteratively and keeping only the first order term, we find

$$\begin{aligned} \eta &\approx \frac{1}{\hbar^2} \langle \varphi(k_0, 0) | F^+(1) Q_0 F(1) | \varphi(k_0, 0) \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]} |\langle \varphi(k_0, 0) | F(1) | \varphi(k, 0) \rangle|^2 dk. \end{aligned} \quad (34)$$

Hence, the adiabatic approximation is applicable when $\eta \ll 1$. This condition is not easy to verify in practice, because in general we do not have enough explicit information about the operator $F(1)$. A different way of writing $\eta \ll 1$, more amenable to interpretation, is to define a normalized time through the variable transformation $t = t_0 + sT$ ($0 \leq s \leq 1$), and the initial normalized state $|\varphi(k_0, t_0)\rangle$ of $H(t_0)$ with the eigenvalue $E(k_0, t_0)$. Then, using Eqs. (16) and (26) and performing the change $s \rightarrow t$ in Eq. (34) yields

$$\begin{aligned} &\langle \varphi(k_0, t_0) | F(t_1) | \varphi(k, t_0) \rangle \\ &= i\hbar \int_{t_0}^{t_1} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E(k_0, t') - E(k, t')] dt' \right\} \\ &\quad \times [\langle \varphi(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle - \langle \varphi(k_0, t) | \delta P(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle] dt. \end{aligned} \quad (35)$$

Since $\langle \varphi(k_0, t) | \delta P(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle = 0$ for $k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]$, Eq. (34) may be recast as

$$\begin{aligned} \eta &\approx \frac{1}{\hbar^2} \int_{k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]} \left| i\hbar \int_{t_0}^{t_1} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E(k_0, t') - E(k, t')] dt' \right\} \right. \\ &\quad \left. - E(k, t') \right] dt \right|^2 dk, \end{aligned} \quad (36)$$

and the adiabatic approximation for $|\varphi(k_0, t_0)\rangle$ holds only if

$$\begin{aligned} &\delta\varphi_{(k_0 \rightarrow k, t)} \\ &= \left| i\hbar \int_{t_0}^{t_1} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [E(k_0, t') - E(k, t')] dt' \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \langle \varphi(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle dt \right|^2 \ll 1, \quad \forall k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]. \end{aligned} \quad (37)$$

The integral of Eq. (37) will be sufficiently small if the phase of the integrated function vibrates fast enough and the amplitude of the integrated function is small enough, thus $\delta\varphi_{(k_0 \rightarrow k, t)}$ is at the maximum

$$\delta\varphi_{(k_0 \rightarrow k, t)} \approx \max_{t \in [t_0, t_1]} \left| \frac{\hbar \langle \varphi(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle}{E(k_0, t') - E(k, t')} \right|^2,$$

$$\forall k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]. \quad (38)$$

The condition $\eta \ll 1$ is therefore, in most cases, certainly satisfied if $\max_{k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]} \delta\varphi_{(k_0 \rightarrow k, t)} \ll 1$ or equivalently,

$$\begin{aligned} &\max_{k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]} |\langle \varphi(k_0, t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle| \\ &\ll \min_{k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]} |E(k_0, t') - E(k, t')|, \quad \forall t \in [t_0, t_1], \end{aligned} \quad (39)$$

with max and min taken over all $k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]$. Condition (39) may be taken as a criterion for the validity of the adiabatic approximation in the case of a continuous spectrum. This estimate of the adiabatic approximation could not be made in the Avron-Elgart approach [5] as mentioned earlier.

IV. GENERALIZED GEOMETRICAL PHASE

The previous adiabatic theorem asserts that the evolved eigenstate of a Hamiltonian at time t_0 ,

$$|\psi(k, t_0)\rangle = |\varphi(k, t_0)\rangle, \quad (40)$$

remains at any time t in the interval $[k, k + \delta k]$.

In order to fully appreciate the meaning of the generalized geometrical phase at the level of the adiabatic Hamiltonian, one should recall the effect of a general time-dependent unitary transformation of the Hilbert space. Let $V(t)$ be such a transformation and define the transformed state vectors as

$$|\tilde{\psi}(k, t)\rangle = V(t) |\psi(k, t)\rangle. \quad (41)$$

The Schrödinger equation (1) defined by the original Hamiltonian, becomes

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\psi}(k, t)\rangle = \tilde{H}(t) |\tilde{\psi}(k, t)\rangle, \quad (42)$$

where the transformed Hamiltonian is

$$\tilde{H}(t) = V(t) H(t) V^+(t) + i\hbar \frac{\partial V(t)}{\partial t} V^+(t). \quad (43)$$

Transformation (41) may be used to yield an exact solution of the Schrödinger equation, if one can find a $V(t)$ that makes the transformed Schrödinger equation (42) easily solvable.

If one defines the unitary operator $V(t)$ in the form

$$V(t) = \int |\varphi(k, 0)\rangle \langle \varphi(k, t) | dk, \quad (44)$$

it is easy to verify that

$$V(t) V^+(t) = \int |\varphi(k, 0)\rangle \langle \varphi(k, 0) | dk = \mathbf{I}. \quad (45)$$

The computation of the terms in the product in Eq. (43) is straightforward as follows:

$$\begin{aligned} \tilde{H}(t) = & \int E(k,t) |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k,0)| dk \\ & - \int \int \langle \varphi(k,t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k',t) \rangle |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k',0)| dk dk'. \end{aligned} \quad (46)$$

The resemblance of this equation to the gauge transformations of the gauge potential in non-Abelian gauge theories is remarkable. Then by virtue of the condition (39), one has

$$\begin{aligned} \tilde{H}(t) = & \int E(k,t) |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k,0)| dk \\ & - \int dk \int_k^{k+\delta k} \langle \varphi(k,t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k',t) \rangle |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k,0)| dk'. \end{aligned} \quad (47)$$

In arriving at Eq. (47) we have made use of the fact that the quantity $\langle \varphi(k,t) | \dot{\varphi}(k',t) \rangle$ is proportional to the Dirac delta function $\delta(k-k')$ [17,18] and therefore we can immediately replace $\langle \varphi(k,t) | \dot{\varphi}(k',t) \rangle |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k',0)|$ by $\langle \varphi(k,t) | \dot{\varphi}(k',t) \rangle |\varphi(k,0)\rangle \langle \varphi(k,0)|$. Note that the adiabatic Hamiltonian (47) gives a familiar dynamical phase $\gamma^D(k,t) = -\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t E(k,t') dt'$ and the generalized Berry phase $\gamma^G(k,t)$ for the continuous spectrum

$$\gamma^G(k,t) = \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k,t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k,t') \rangle dt'. \quad (48)$$

Note that all properties of the geometrical phase in discrete case are fulfilled by the generalized geometrical phase (48) for the continuous case. As the interval $[k, k+\delta k]$ is located inside of the interval $[-\infty, +\infty]$ and the quantity $\langle \varphi(k,t) | \dot{\varphi}(k',t) \rangle$ is proportional to the Dirac delta function $\delta(k-k')$, we can write the generalized geometrical phase in the following practical form:

$$\gamma^G(k,t) = \int_{t_0}^t \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \varphi(k',t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi(k,t') \rangle dt' dk', \quad (49)$$

which embodies another central result of this paper. We now want to analyze the nature of the phase (49) through examples.

A. Relativistic spinning particle in an electromagnetic field

The Dirac Hamiltonian of a particle in a time-dependent electromagnetic field [19,20] can be written in a four-dimensional Hilbert space spanned by the two-dimensional basis state $|1\rangle$ and $|2\rangle$ as

$$\begin{aligned} H_D(t) = & m(t)c^2 [|1\rangle \langle 1| - |2\rangle \langle 2|] + c\sigma^3 [p - f(t)] |1\rangle \langle 2| \\ & + c\sigma^3 [p - f^*(t)] |2\rangle \langle 1|, \end{aligned} \quad (50)$$

where p is the momentum operator, the mass $m(t)$ and the complex parameter $f(t)$ are periodic slow functions of time, and σ^3 is the 2×2 standard Pauli matrix. In this way $|\psi(t)\rangle$ is a four-dimensional spinor state. In fact, in the nonrelativistic limit [19], this Hamiltonian reduces to a Hamiltonian of a

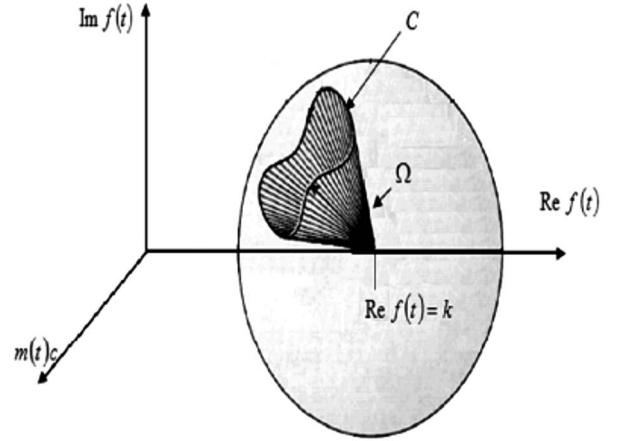


FIG. 3. Solid angle subtended by the closed curve C .

charged particle interacting with an electromagnetic field in the so-called dipole approximation, i.e., the vector potential $eA(t) = \text{Re } f(t)$ and the scalar potential $eV(t) = \frac{\text{Im } f(t)}{2m(t)}$ are only functions of time but do not depend on coordinates.

At any time t , the instantaneous eigenstates of the Hamiltonian, normalized to a δ -Dirac function (50) are

$$\begin{aligned} |\varphi^\pm(z, k, t)\rangle = & \left\{ \frac{c\sigma^3 g(k,t)}{\sqrt{[m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k,t)]^2 + |g(k,t)|^2 c^2}} |1\rangle \right. \\ & \left. + \frac{m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k,t)}{\sqrt{[m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k,t)]^2 + |g(k,t)|^2 c^2}} |2\rangle \right\} \frac{e^{(i/\hbar)kz}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \end{aligned} \quad (51)$$

and correspond to the eigenvalues $\pm \hbar\omega(k,t) = \pm c\sqrt{m^2(t)c^2 + |g(k,t)|^2}$ and $g(k,t) = f(t) - k$.

Substituting Eq. (51) in Eq. (49) leads to

$$\gamma^G(k,t) = \frac{i\hbar c^2}{2} \int_{t_0}^t \frac{g^*(k,t') \dot{g}(k,t') - \dot{g}^*(k,t') g(k,t')}{[m(t)c^2 \mp \hbar\omega(k,t)]^2 + |g(k,t)|^2 c^2} dt', \quad (52)$$

when we use the following representation of the adiabatic parameters $[\text{Re } f(t) - k]c = \hbar\omega \sin \theta \cos \varphi$, $\text{Im } f(t)c = \hbar\omega \sin \theta \sin \varphi$, and $m(t)c^2 = \hbar\omega \cos \theta$; ω , θ , and φ are now chosen as time-dependent adiabatic quantities. The generalized geometrical phase is nothing but the solid angle subtended by the closed curve C when seen from $(k, 0, 0)$ in $[\text{Re } f(t), \text{Im } f(t), m(t)c]$ space (see Fig. 3), i.e.,

$$\gamma^G(k, C) = -\frac{\hbar}{2} \Omega. \quad (53)$$

B. Geometrical aspect of the S matrix

A very general way of looking at the S matrix as a geometric phase factor has been implicitly provided by Newton [13], where the expression for a geometrical phase looks strikingly similar to the equation of the wave operator in the interaction picture. This leads Newton to conclude that the S matrix appears in a geometric phase as an expression of the

adiabatic switching on and off of the interaction. Here we show explicitly that, in the case of an elastic scattering, the generalized geometrical phase (49) is nothing but the diagonal element of the S matrix.

The state vector $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$ of the given physical system is assumed to satisfy the Schrödinger equation (1), $U(t, t_0)$ being the unitary evolution operator associated to the Hamiltonian operator $H(t)$. In order to solve Eq. (1) under the adiabatic assumption, we assume that the Hamiltonian can be split into two parts,

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (54)$$

so that H_0 represents the noninteracting particles Hamiltonian. In other words, H_0 represents the free Hamiltonian operator. For the present we have primarily elastic scattering in mind, and we may think of $V(t)$ as the time-dependent potential of interaction. We assume that $V(t)$ varies slowly in time with

$$V(t) \neq 0, \quad t_0 < t < t_1. \quad (55)$$

In scattering problems, we are interested in calculating transition amplitudes between states $|\varphi^F(k)\rangle$ (F stands for free evolution). The system initially in the state

$$|\psi(-\infty)\rangle = |\varphi^F(k_0)\rangle \quad (56)$$

evolves freely towards the interaction region

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t \leq t_0} E(k_0) dt'\right] |\varphi^F(k_0)\rangle, \quad (57)$$

under the action of the free Hamiltonian H_0 whose eigenstates in the continuous spectrum are defined as

$$H_0 |\varphi^F(k)\rangle = E(k) |\varphi^F(k)\rangle. \quad (58)$$

Let us now expand the state vector $|\psi(t)\rangle$ on the basis of the instantaneous eigenstates $|\varphi(k, t)\rangle$ of $H(t)$ in the continuous spectrum

$$|\psi(t)\rangle = \int C^{ad}(k, t) |\varphi(k, t)\rangle dk \quad (59)$$

(where ad stands for adiabatic evolution). By using the results of the third section of this paper, one can easily find

$$C^{ad}(k', t) = \delta(k' - k) \exp\left[-\int_{t_0}^t \left(\frac{i}{\hbar} E(k', t') + \langle \delta\varphi(k, t') | \frac{\partial}{\partial t'} |\varphi(k', t')\rangle\right) dt'\right], \quad k' \in [k, k + \delta k]. \quad (60)$$

Expansion of $|\psi(t)\rangle$ on the basis of the instantaneous eigenstates $|\varphi^F(k)\rangle$ of H_0 leads to

$$|\psi(t)\rangle = \int C^F(k, t) |\varphi^F(k)\rangle dk, \quad (61)$$

from which we may conclude by comparison with Eq. (59) that

$$C^F(k, t) = \int C^{ad}(k', t) \langle \varphi^F(k) | \varphi(k', t) \rangle dk', \quad (62)$$

with the initial condition (56), i.e., $C^F(k, -\infty) = \delta(k - k_0)$.

The coefficients $C^F(k, t)$ represent the matrix elements of the evolution operator $U(t, t_0)$ in the basis $\{|\varphi^F(k)\rangle\}$,

$$C^F(k, t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t E(k_0) dt'\right] \langle \varphi^F(k) | U(t, t_0) | \varphi^F(k_0) \rangle. \quad (63)$$

In the interaction picture, the solution of the Schrödinger equation is transformed to

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \exp\left[\frac{i}{\hbar} H_0(t - t_0)\right] |\psi(t)\rangle. \quad (64)$$

The corresponding evolution operator $\tilde{U}(t, t_0)$ is related to the time-dependent unitary operator $U(t, t_0)$ by

$$\tilde{U}(t, t_0) = \exp\left[\frac{i}{\hbar} H_0(t - t_0)\right] U(t, t_0). \quad (65)$$

It is easily verified that, using Eqs. (63) and (64), the matrix elements of this time-dependent operator between the eigenstates of the unperturbed Hamiltonian H_0 satisfy

$$\begin{aligned} & \langle \varphi^F(k) | \tilde{U}(t, t_0) | \varphi^F(k_0) \rangle \\ &= C^F(k, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(E(k)(t - t_0) + \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0) dt'\right)\right]. \end{aligned} \quad (66)$$

Let us now insert Eq. (60) in Eq. (62). This yields, taking into account that the collision is elastic and the initial condition (56),

$$C^F(k, t) = \langle \varphi^F(k) | \varphi(k_0, t) \rangle \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E(k_0)(t - t_0) - \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0, t') | \frac{\partial}{\partial t'} |\varphi(k_0, t')\rangle dt'\right]. \quad (67)$$

A comparison of Eq. (66) with Eq. (67) reveals that

$$\begin{aligned} & \langle \varphi^F(k) | \tilde{U}(t, t_0) | \varphi^F(k_0) \rangle \\ &= \langle \varphi^F(k) | \varphi(k_0, t) \rangle \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{t_0} E(k_0) dt' - \int_{t_0}^t \langle \delta\varphi(k_0, t') | \frac{\partial}{\partial t'} |\varphi(k_0, t')\rangle dt'\right]. \end{aligned} \quad (68)$$

As expected, the initial ($t \leq t_0$) and final ($t \geq t_1$) eigenstates of the free Hamiltonian H_0 are identical, i.e.,

$$|\varphi^F(k_0, t \geq t_1)\rangle = |\varphi^F(k)\rangle. \quad (69)$$

By pushing the initial time into the distant past, i.e., letting $t_0 \rightarrow -\infty$, similarly $t \rightarrow +\infty$ signals that the scattering process is complete, and we obtain the scattering matrix or S matrix

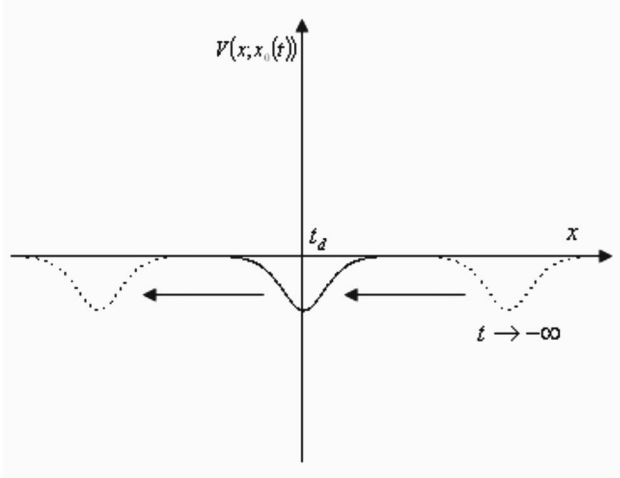


FIG. 4. Potential positions in the course of time.

$$\begin{aligned} \langle \varphi^F(k) | S | \varphi^F(k_0) \rangle &= \langle \varphi^F(k) | \lim_{t \rightarrow +\infty, t_0 \rightarrow -\infty} \tilde{U}(t, t_0) | \varphi^F(k_0) \rangle \\ &= \delta(k - k_0) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k_0, +\infty) \right]. \end{aligned} \quad (70)$$

On the basis of this comparison we may conclude that after the Hamiltonian completes an adiabatic closed curve from H_0 via $H(t)$ back to H_0 , the state which initially was given by $|\varphi^F(k, t_0)\rangle$ has gone over into a new state that differs from it by a unitary transformation

$$S | \varphi^F(k) \rangle = S_k | \varphi^F(k) \rangle, \quad (71)$$

where S_k is the eigenvalue of the unitary S matrix, and it is related to the generalized geometrical phase (49) by

$$S_k = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \gamma^G(k, +\infty) \right]. \quad (72)$$

This result expresses the geometric aspect of the S matrix and represents the transmission amplitude $t(k)$ [14].

C. Scattering by a reflectionless potential

Our final example is the unidimensional potential

$$V(x, t) = - \frac{\hbar^2 k_1^2}{m (\cosh\{k_1[x - x_0(t)]\})^2}, \quad (73)$$

which is reflectionless for all values of the incident energy, m is the particle's mass, k_1 is a constant, and $x_0(t)$ is a slowly time-dependent function satisfying $x_0(t) = \pm \infty$ as $t \rightarrow \mp \infty$ (Fig. 4).

We have introduced a parameter in the potential indicating its position in space so that a change in the parameter displaces the potential bodily without any change of its shape. In particular, the spectrum of eigenvalues is independent of the value of this parameter. At time $t = -\infty$, the

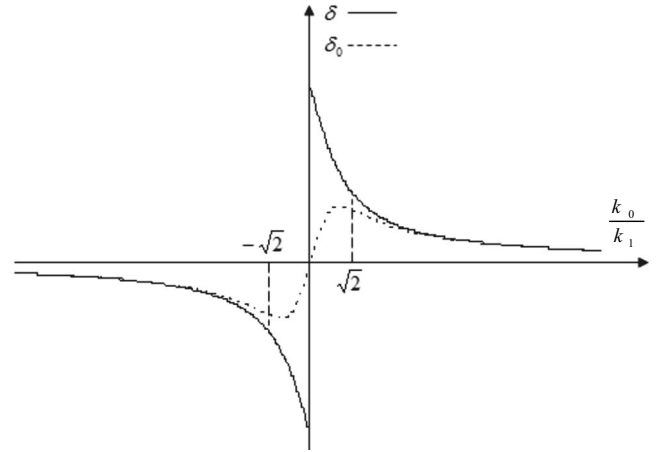


FIG. 5. The geometrical phase for the reflectionless potential.

particle is in the free state as a plane wave and the potential is far to the right of it at $x = \infty$. Now the parameter is varied so as to let the potential interact adiabatically with the particle and then recede to $x = -\infty$ at time $t = \infty$. We are left with a plane wave with its phase shifted and proceeding to $x = \infty$. The potential $V(x, t)$ (73) has a single bound state of energy $E_{k=k_1} = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$ and whose exact positive energy solutions given by

$$\varphi[x, k, x_0(t)] = (ik - k_1 \tanh\{k_1[x - x_0(t)]\}) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi(k_1 + ik)}}, \quad (74)$$

are normalized in terms of the eigendifferentials [21].

Inserting Eq. (74) in Eq. (49) we get

$$\gamma^G(k, +\infty) = \frac{2\hbar k_1 k}{k^2 + k_1^2}, \quad (75)$$

which gives according to Eq. (72),

$$S_k = t(k) = \exp \left[2i \frac{k_1 k_0}{k_0^2 + k_1^2} \right] = e^{i\delta_0}. \quad (76)$$

This agrees with the results for the transmission amplitude obtained by Ghosh [14] and is a good approximation for the well known exact transmission amplitude [14].

$$t(k) = \exp \left[2i \arctan \left(\frac{k_1}{k} \right) \right] = e^{i\delta}, \quad (77)$$

obtained in the time-independent case. Figure 5 illustrates indeed a good agreement between the exact value δ (solid line) of the argument of the transmission amplitude and δ_0 (dashed line), the value of the generalized geometrical phase. The interval $[-\sqrt{2}, \sqrt{2}]$ corresponds to a discrete spectrum region.

V. CONCLUSION

We have presented a simple and practical form of the generalized adiabatic theorem. We have examined in a direct manner its demonstration as well as the validity condition of the adiabatic approximation, similar to the one used in the discrete case. As it appears in the title, we give some applications of this adiabatic theorem, in particular, the generalization of the geometrical Berry phase for the continuous spectrum and its connection with the scattering matrix.

ACKNOWLEDGMENT

We acknowledge fruitful discussions with Professor J. P. Provost (INLN) at Nice University.

[1] M. Born and V. Fock, *Z. Phys.* **51**, 165 (1928).
 [2] T. Kato, *J. Phys. Soc. Jpn.* **5**, 435 (1950).
 [3] A. Lenard, *Ann. Phys.* **6**, 261 (1959); L. M. Garrido, *J. Math. Phys.* **5**, 355 (1964); F. J. Sancho, *Proc. Phys. Soc. London* **89**, 1 (1966).
 [4] G. Nenciu, *J. Phys. A* **13**, L15 (1980); J. E. Avron, R. Seiler, and L. G. Yaffe, *Commun. Math. Phys.* **110**, 33 (1987).
 [5] J. E. Avron and A. Elgart, *Commun. Math. Phys.* **203**, 445 (1999).
 [6] A. Joye and C. Pfister, *J. Phys. A* **24**, 753 (1991); S. Jansen, M. B. Ruskai, and R. Seiler, *J. Math. Phys.* **48**, 102111 (2007).
 [7] K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 160408 (2004); Zhaoyan Wu and Hui Yang, *Phys. Rev. A* **72**, 012114 (2005); Solomon Duki, H. Mathur, and Onuttom Narayan, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 128901 (2006); Jie Ma, Yongping Zhang, Enge Wang, and Biao Wu, *ibid.* **97**, 128902 (2006); K.-P. Marzlin and B. C. Sanders, *ibid.* **97**, 128903 (2006).
 [8] A. Ambainis and O. Regev, e-print arXiv:quant-ph/0411152; M. S. Sarandy, L.-A. Wu, and D. A. Lidar, *Quantum Inf. Process.* **3**, 331 (2004); D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, and C. H. Oh, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 110407 (2005); **98**, 150402 (2007); R. MacKenzie, E. Marcotte, and H. Paquette, *Phys. Rev. A* **73**, 042104 (2006).
 [9] F. Bornemann, *Homogenization in Time of Singularly Perturbed Mechanical Systems*, Lecture Notes in Mathematics Vol. 1687 (Springer, Berlin, 1998).
 [10] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **392**, 45 (1984).
 [11] J. Oreg, F. T. Hioe, and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **29**, 690 (1984); S. Schiemann, A. Kuhn, S. Steuerwald, and K. Bergmann, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3637 (1993); P. Pillet, C. Valentin, R. L. Yuan, and J. Yu, *Phys. Rev. A* **48**, 845 (1993).
 [12] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser, e-print arXiv:quant-ph/0001106; A. M. Childs, E. Farhi, and J. Preskill, *Phys. Rev. A* **65**, 012322 (2001).
 [13] R. G. Newton, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 954 (1994).
 [14] G. Ghosh, *Phys. Lett. A* **210**, 40 (1996).
 [15] W. Greiner, *Quantum Mechanics: An Introduction* (Springer, New York, 2000).
 [16] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1962).
 [17] M. Maamache and Y. Saadi, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 150407 (2008).
 [18] In [17] it is shown that the $|\psi(k, t)\rangle$ solution of the Schrödinger equation has the form $e^{i\theta_k(t)}|\varphi(k; t)\rangle$. To find the phase, we will substitute this solution into the Schrödinger equation and this will lead to the following result $\hbar \frac{d}{dt} \theta_k(t) |\varphi(k; t)\rangle = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - H |\varphi(k; t)\rangle$. We then project this equation onto the $\langle \varphi(k'; t) |$, and one finds that the $\langle \varphi(k', t) | \dot{\varphi}(k, t) \rangle$ is proportional to $\delta(k - k')$.
 [19] M. Maamache and H. Lakehal, *Europhys. Lett.* **67**, 695 (2004).
 [20] This example has been treated by one of us [19] for the non-adiabatic case using the Lewis-Riesenfeld theory where $f(t)$ is a real function of time. In Ref. [19] it was shown that, in the adiabatic limit, a Berry phase appears; in fact, this is not true because $f(t)$ is real, which leads to a vanishing Berry phase. The example treated here, where $f(t)$ is a complex parameter, gives a nonvanishing geometrical phase, which is the solid angle.
 [21] The functions (74) are normalized in terms of the eigendifferentials (3). Indeed,

$$\langle \varphi(k, x_0) | \varphi(k', x_0) \rangle = \delta(k - k') - \frac{k_1}{\pi(k_1 - ik)(k_1 + ik')} \times \lim_{L \rightarrow \infty} \cos[(k - k')L].$$

The last term takes any values between -1 and $+1$. Now, replacing $\langle \varphi(k, x_0) |$ by the corresponding eigendifferential we get

$$\langle \delta\varphi(k, x_0) | \varphi(k', x_0) \rangle = \int_k^{k+\delta k} \delta(k'' - k') dk'' + \frac{k_1 \tanh[k_1(x - x_0)]}{2i\pi(k_1 - ik)(k_1 + ik')x} \times e^{i(k-k')x} (e^{-i\delta kx} - 1) \Big|_{-\infty}^{\infty},$$

since the second term vanishes, then we can choose $\lim_{L \rightarrow \infty} \cos[(k - k')L] = 0$ without ambiguity [16].



Non-adiabatic quantum evolution: The S matrix as a geometrical phase factor

Y. Saadi*, M. Maamache

Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques, Faculté des Sciences, Université Ferhat Abbas de Sétif, Sétif 19000, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 22 October 2011

Received in revised form 5 February 2012

Accepted 27 February 2012

Available online 2 March 2012

Communicated by P.R. Holland

This work is dedicated to the memory of Mr. A.L. Ayadi, head of the Agronomy Department, University Ferhat Abbas of Sétif, Algeria

Keywords:

Non-adiabatic evolution

Geometrical phase

Lewis and Riesenfeld theory

Scattering matrix

Continuous spectrum

ABSTRACT

We present a complete derivation of the exact evolution of quantum mechanics for the case when the underlying spectrum is continuous. We base our discussion on the use of the Weyl eigendifferentials. We show that a quantum system being in an eigenstate of an invariant will remain in the subspace generated by the eigenstates of the invariant, thereby acquiring a generalized non-adiabatic or Aharonov–Anandan geometric phase linked to the diagonal element of the S matrix. The modified Pöschl–Teller potential and the time-dependent linear potential are worked out as illustrations.

© 2012 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Quantum geometric phase have been attracting significant research interest in the recent 30 years. Berry [1] showed that, an eigenstate of parameter-dependent Hamiltonian $H(\vec{X}(t))$ varying adiabatically and cyclically acquires, besides the well-known dynamical phase $e^{-i\hbar^{-1} \int E_n(t) dt}$, a geometrical phase

$$\gamma_n^G(C) = \oint_C \langle \psi_n(\vec{X}) | i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{X}} | \psi_n(\vec{X}) \rangle d\vec{X}, \quad (1)$$

which depends essentially on the closed path C that has been followed in the parameters space. As explained by Simon [2], the geometrical transport, along C , that brings an initial eigenstate to the evolved state, can be derived from the natural connection of the line bundle. Later, the geometric phase was, generalized to the cases of degenerate energy eigenstates by Wilczek and Zee [3].

Removing the adiabatic hypothesis, Aharonov and Anandan [4] have reformulated and generalized Berry's result and shown that such a geometrical phase may appear for any state which is cyclic with respect to some evolution. They defined their non-adiabatic geometrical phase for the cyclic evolution in the projective Hilbert space by removing the dynamical part, identified as the integral of

the expectation value of the Hamiltonian $\hbar^{-1} \int_0^T \langle \Psi(t) | H(t) | \Psi(t) \rangle dt$, from the total phase φ . They showed that the geometrical phase can be written in the form

$$\beta^G = \int_0^T \langle \tilde{\psi}(t) | i \frac{d}{dt} | \tilde{\psi}(t) \rangle dt, \quad (2)$$

where $|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{-if(t)} |\Psi(t)\rangle$ with $f(T) - f(0) = \varphi$ such that $|\tilde{\psi}(T)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle$. The cyclic states can be obtained as eigenstates of a periodic invariant operator $I(T) = I(0)$ introduced by Lewis and Riesenfeld [5]. In general, even for non-adiabatic, non-unitary and non-cyclic evolutions, a reparametrization invariant phase can be defined which is associated with a curve in the ray space [6,7].

In their classical paper on dynamical invariant $I(t)$, Lewis and Riesenfeld [5] are very close to discover the geometric phase. They showed that for a quantal system characterized by a time-dependent Hamiltonian $H(t)$ and a Hermitian invariant operator $I(t)$, the eigenstate $|\phi_n(t)\rangle$ of $I(t)$ develops a global phase given by

$$\hbar\theta_n(t) = \int_0^t \langle \phi_n(t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H \right] | \phi_n(t') \rangle dt', \quad (3)$$

where

$$\hbar\theta_n^g(t) = \int_0^t \langle \phi_n(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \phi_n(t') \rangle dt', \quad (4)$$

* Corresponding author. Tel.: +213 0 661571157; fax: +213 0 36926153.
E-mail address: S_yahiadz@yahoo.fr (Y. Saadi).

has been interpreted as a non-adiabatic geometrical phase after Berry's phase discovery. The correspondence of Berry's phase and Lewis–Riesenfeld phase has been pointed out by Morales [8] for the case of quadratic Hamiltonians. Notice that Berry's analysis corresponds to the case where $H(0) = I(0)$ (and an adiabatic evolution) and the one of Aharonov–Anandan to the case $I(0) = |\tilde{\psi}(0)\rangle\langle\tilde{\psi}(0)|$ (and a cyclic evolution).

Most of the works on both geometrical phase and the invariant theory are confined to discrete spectra. In the case of continuous spectra, such as in the scattering theory, Newton [9] within non-interaction picture method revealed that its geometric phase factor is connected to the S matrix. In order to reinterpret the usual scattering phase shift as an adiabatic phase in the spirit of the original investigation of Berry, Ghosh [10] extended the adiabatic approximation to the continuous spectra like an *ansatz* and confined the derivation to a one-dimensional scattering problem with negligible reflection.

Using the Weyl eigendifferentials [12,13]

$$|\delta\phi_k(t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} |\phi_{k'}(t)\rangle dk' \quad (5)$$

which in some sense “technically discretizes” the continuous spectrum and lays the basis for transferring all the concepts known for discrete spectra to the continuous case, Maamache and Saadi [11] have proved the adiabatic theorem for Hamiltonian systems with continuous spectra and addressed the corresponding generalization of the concept of the adiabatic Berry's phase to the continuous case

$$\gamma_k^G(t) = \int_0^t \langle \delta\psi_k(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \psi_k(t') \rangle dt' \quad (6)$$

($|\psi_k(t)\rangle$ is an eigenstate of the instantaneous Hamiltonian) and showed that the generalized geometrical phase is the diagonal element of the S matrix, yielding a consistent picture. Very recently, Liu and Yi [14] explored the geometric phase in the scattering process by taking only the transmission process into account.

Important questions motivate our work: How could one treat the time-dependent quantum problems for a continuous spectrum and investigate the possibility of finding geometric phases related to the invariant operator theory? Should the S matrix conserve its geometric aspect without recourse to adiabaticity (i.e. in a cyclic evolution)? The key idea in this Letter is the use of the Weyl eigendifferentials in order to present a theoretical proof of the exact quantum evolution for systems whose Hamiltonians and their invariants have a completely continuous spectrum supposed to be non-degenerated. The expression for the obtained total phase is expressed in terms of the eigenvectors of the invariant operator. Once the generalization of the invariants theory is established, we show, based on the cyclicity of the scattering problems, that the geometric aspect of the S matrix is independent of the nature of the time evolution of the system.

2. Exact evolution for continuous spectrum

2.1. Review of the discrete spectrum case

Let us recall that the general method to introduce the Lewis and Riesenfeld theory, valid whatever the time dependence of the parameters, considers invariant operators. For a system specified by a time-dependent Hamiltonian $H(t)$, and a corresponding evolution operator $U(t)$, an invariant is an operator $I(t)$ such that

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[I, H] = 0. \quad (7)$$

We note that in view of Eq. (7) any dynamical invariant satisfies

$$I(t) = U(t)I(0)U^{-1}(t). \quad (8)$$

It possesses a remarkable property that any eigenstate $|\phi_n(0)\rangle$ of an invariant operator at time zero $I(0)$ evolves continuously into the corresponding eigenstate $|\phi_n(t)\rangle$ of the invariant operator $I(t)$ at time t (each eigenstate is associated with the time-independent eigenvalue λ_n),

$$|\Psi_n(t)\rangle = U(t)|\phi_n(0)\rangle = e^{i\theta_n(t)}|\phi_n(t)\rangle \quad (9)$$

exactly as an eigenstate of the Hamiltonian does when the evolution is adiabatic. It follows from the Schrödinger equation ($i\hbar\partial/\partial t - H(t)|\Psi_n(t)\rangle = 0$) that the corresponding global phase $\theta_n(t)$ satisfies the relation (3).

One way to describe the Lewis and Riesenfeld's exact quantum evolution is to introduce the concept of elementary projectors on an eigenstate $|\phi_n(t)\rangle$ of the invariant operator $I(t)$

$$P_n(t) = |\phi_n(t)\rangle\langle\phi_n(t)|. \quad (10)$$

It is easy to verify that each projector $P_n(t)$ is therefore a constant of motion, i.e., $P_n(t) = U(t)P_n(0)U^\dagger(t)$, and the exact evolution can be formally written, in terms of the evolution operator as

$$\forall t: U(t)P_n(0) = P_n(t)U(t). \quad (11)$$

Notice that if, initially, the system is in the eigenstate $|\phi_n(0)\rangle$ so that $I(0)|\phi_n(0)\rangle = \lambda_n|\phi_n(0)\rangle$, then

$$P_n(0)|\phi_n(0)\rangle = |\phi_n(0)\rangle \quad (12)$$

and (11) gives

$$U(t)|\phi_n(0)\rangle = P_n(t)U(t)|\phi_n(0)\rangle. \quad (13)$$

2.2. Generalization to the continuous spectrum case

The Lewis and Riesenfeld theory in a continuous spectrum was raised for the first time by Hartley and Ray [15] where they extended this theory for a general Ermakov system to cases where the invariant has continuous eigenvalues. They looked, as an *ansatz*, at the eigenfunctions in a continuous spectrum $|\phi_k(t)\rangle$ of the invariant operator $I(t)$ and the solution $|\Psi_k(t)\rangle$ of the Schrödinger equation in the form

$$|\Psi_k(t)\rangle = e^{i\theta_k(t)}|\phi_k(t)\rangle. \quad (14)$$

The limitation of the Hartley–Ray approach is that, in general, there is no explicit formula of Lewis and Riesenfeld phase and they didn't deal with problems having continuous spectra of origin. In the following, we will show that (14) is a solution of the Schrödinger equation, this has not been shown before in the continuous case.

To find the phase, usually most authors [16] will substitute the solution (14) into the Schrödinger equation which leads to the following result

$$\hbar \frac{d}{dt} \theta_k(t) |\phi_k(t)\rangle = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] |\phi_k(t)\rangle, \quad (15)$$

and then project this equation onto the $\langle\phi_k(t)|$ (this procedure is clearly parallel to that for the discrete case), it follows that the corresponding global phase $\theta_k(t)$ satisfies the relation $\hbar \frac{d}{dt} \theta_k(t) \delta(0) = \langle\phi_k(t)| [i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H] |\phi_k(t)\rangle$ which is infinite, i.e., $\delta(0) = \infty$. In fact, it's well known and easily shown that the term $\langle\phi_k(t)| [i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H] |\phi_{k'}(t)\rangle$ is a one-point support distribution,

i.e. $\text{supp}(\langle \phi_k(t) | [i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H] | \phi_{k'}(t) \rangle) = \{k'\}$ that can be written as $\sum_n \Gamma_n(k) \delta^{(n)}(k - k')$ [17] which diverges when $k = k'$ and which will lead to a finite result when integrated over k or k' (for an illustration see Appendix A).

Before proceeding further, we give the statement of the exact quantum evolution. Given a time-dependent Hamiltonian system $H(t)$ with a continuous spectrum, it is possible to build a Hermitian invariant operator $I(t)$ verifying (7), such that its eigenvalues λ_k are purely continuous and constants

$$I(t) | \phi_k(t) \rangle = \lambda_k | \phi_k(t) \rangle. \tag{16}$$

Let us call $U(t)$ the evolution operator associated to the time-dependent Hamiltonian $H(t)$. The evolution of the system obeys to the Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi_k(t) \rangle = H(t) | \Psi_k(t) \rangle. \tag{17}$$

It is easy to verify that each differential projection operator

$$\delta P_k(t) = \int_k^{k+\delta k} | \phi_{k'}(t) \rangle \langle \phi_{k'}(t) | dk', \tag{18}$$

$$\delta P_k(t) | \Psi(t) \rangle = \int_k^{k+\delta k} C_{k'}(t) | \phi_{k'}(t) \rangle dk' \tag{19}$$

is therefore a constant of motion, i.e.,

$$\delta P_k(t) = U(t) \delta P_k(0) U^\dagger(t).$$

Under these conditions it is possible to state the exact quantum evolution: “If the time-dependent quantum systems whose Hamiltonians and their invariants have a completely continuous non-degenerated spectrum are initially in an eigenstate $|\phi_k(0)\rangle$ of $I(0)$ then the state of the system at any time t will remain in the subspace generated by the eigenstates $|\phi_k(t)\rangle$ of $I(t)$ pertaining to the interval $[k, k + \delta k]$ ”. In other words, the exact evolution can be formally written in terms of the evolution operator as

$$\forall k, \forall t: U(t) \delta P_k(0) = \delta P_k(t) U(t). \tag{20}$$

Notice that if, initially, the system is in the state $|\Psi_k(0)\rangle = |\phi_k(0)\rangle$, then (20) implies that

$$\delta P_k(t) U(t) | \Psi_k(0) \rangle = U(t) \delta P_k(0) | \Psi_k(0) \rangle. \tag{21}$$

Expanding an arbitrary state vector $|\Psi(t)\rangle$ on the basis of the instantaneous quasi-eigenfunction of $I(t)$ and using (19) we obtain

$$| \Psi_k(t) \rangle = \int_k^{k+\delta k} C_{k'}(t) | \phi_{k'}(t) \rangle dk'; \quad \forall k' \in [k, k + \delta k], \tag{22}$$

we see that the state $|\Psi_k(t)\rangle$ belongs to the subspace generated by the states $|\phi_k(t)\rangle$ pertaining to the interval $[k, k + \delta k]$. Inserting (22) in the Schrödinger equation (17) and multiplying the obtained result by $\langle \delta \phi_k(t) |$, one finds

$$\int_k^{k+\delta k} C_{k'}(t) \langle \delta \phi_k(t) | \left[H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] | \phi_{k'}(t) \rangle dk' = \int_k^{k+\delta k} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C_{k'}(t) dk'. \tag{23}$$

Since k can sweep all the possible values and the intervals δk should be small ($\delta k \rightarrow 0$), the equality (23) between integrals implies the equality between integrands which gives after integration

$$C_{k'}(t) = \delta(k' - k) \exp \left[-i \int_0^t dt' \langle \delta \phi_k(t') | \frac{1}{\hbar} H(t') - i \frac{\partial}{\partial t'} | \phi_{k'}(t') \rangle \right], \tag{24}$$

hence

$$| \Psi_k(t) \rangle = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \theta_k(t) \right\} | \phi_k(t) \rangle, \tag{25}$$

where $\theta_k(t)$ is the global phase given by

$$\theta_k(t) = \int_0^t \langle \delta \phi_k(t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] | \phi_k(t') \rangle dt'. \tag{26}$$

This global phase is a generalization to any time evolution of the result obtained in the case of adiabatic evolution in which the invariant eigenvectors $|\phi_k(t)\rangle$ are replaced by the Hamiltonian eigenvectors and where the interval δk is inversely linked to the adiabatic period T , a relation that ensures the adiabatic approximation which is not the case here; indeed, δk is time independent and can be freely chosen. Moreover, using the properties of the Dirac distribution, the integral included in the eigendifferential will ensure the finite value of the new phase (see Appendix A), indeed,

$$\begin{aligned} \theta_k(t) &= \int_0^t \int \langle \phi_k(t') | \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') \right] | \phi_k(t') \rangle dk' dt' \\ &= \int_0^t \int \sum_n \Gamma_n(k, t) \delta^{(n)}(k - k') dk' dt' \\ &= \int_0^t \sum_n (-1)^n \Gamma_n^{(n)}(k, t) dt'. \end{aligned} \tag{27}$$

The explicit formula of the global phase (26), not derived in the Hartley–Ray approach [15] as mentioned earlier, shows that the phase factor is not equal to the dynamical contribution $\hbar^{-1} \int_0^t \langle \delta \phi_k(t') | H(t') | \phi_k(t') \rangle dt'$, but acquires an additional geometric contribution for the continuous spectrum

$$\theta_k^G(t) = \int_0^t \langle \delta \phi_k(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \phi_k(t') \rangle dt'. \tag{28}$$

It is furthermore important that all the properties of the geometrical phase in the discrete case are fulfilled by the generalized version (28).

3. Cyclic evolution and the S matrix

We will now show how this result gives the cyclic evolution. In the discrete spectrum case, the quantity of main importance in the study of the periodic systems, cyclic states and the accompanying phases is the evolution operator $U(t)$. For a T -periodic invariant $I(T) = I(0)$ and T -periodic Hamiltonian $H(T) = H(0)$, the initial state vectors $|\Psi_n(0)\rangle = |\phi_n(0)\rangle$ undergo cyclic evolutions

$$| \Psi_n(T) \rangle = e^{i\theta_n(T)} | \phi_n(0) \rangle. \tag{29}$$

Thus we can deal with the geometrical phase in the evolution of an eigenspace of the invariant operator in the framework of the Aharonov–Anandan phase theory. In the present case, each eigenspace of the invariant operator is a ray in the Hilbert space and hence is a point in the projective Hilbert space, so that the

evolution of eigenspaces corresponds exactly to the evolution of physical pure states. Choosing a time-dependent elementary projectors (10) on an eigenstate $|\phi_n(t)\rangle$ of the invariant operator $I(t)$ such that $|\Psi_n(t)\rangle\langle\Psi_n(t)| = |\phi_n(t)\rangle\langle\phi_n(t)|$ and $|\Psi_n(0)\rangle = |\phi_n(0)\rangle = |\phi_n(T)\rangle$, then the cyclic evolution can be formally obtained from the exact evolution (11) in terms of the evolution operator as

$$U(T)P_n(0) = P_n(0)U(T). \tag{30}$$

In the case of a continuous spectrum, we can state that the cyclic evolution can be written as

$$U(T)\delta P_k(0) = \delta P_k(0)U(T) \tag{31}$$

and the cyclic states $|\Psi_k(0)\rangle = |\phi_k(0)\rangle$ for the evolution in question are precisely the eigenstates of $U(T)$ with eigenphases $\theta_k(T)$, as can be seen from (21), i.e. each state returns to itself after time T (in the evolution associated with $H(t)$ up to a phase $\theta_k(T)$).

In order to illustrate this result better, we discuss here the scattering processes. In a scattering process a state of a particle is prepared in the remote past. It evolves freely until it enters in the interaction region, in which the particle is scattered elastically by the time-dependent potential. Then, it goes out of the interaction region and evolves freely until the state is detected in the far future, i.e., when it reaches the asymptotic limit. The scattering processes considered are characterized by (i) the free Hamiltonian $H_0 = \frac{p^2}{2m}$ governing the evolution of the state before and after the interaction takes place where p is the momentum and m the mass, and (ii) the interaction $H'(x - vt)$ with $H'(t \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ where v is an arbitrary constant that can be interpreted as a classical velocity. The global Hamiltonian is

$$H(t) = H_0 + H'(x - vt) \tag{32}$$

and the associated invariant, given by

$$I(t) = H_0 + H'(x - vt) - vp \tag{33}$$

produces a cyclic change of $H(t)$ and $I(t)$ so that $H(-\infty) = H(\infty)$ and $I(-\infty) = I(\infty)$. We next define instantaneous eigenfunctions

$$\phi_k(x - vt) = e^{\frac{imv}{\hbar}(x-vt)} \Phi_k(x - vt), \tag{34}$$

which means that

$$\phi_k(x - vt) = e^{-\frac{iv}{\hbar}p(t-t_0)} \phi_k(x - vt_0), \tag{35}$$

and Φ_k satisfies

$$H\Phi_k = E_k\Phi_k, \tag{36}$$

where

$$E_k = \lambda_k + \frac{mv^2}{2}$$

are the eigenvalues (energies) of the Hamiltonian.

For $k \in [k_0, k_0 + \delta k_0]$, in the interaction picture

$$\tilde{U}(t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}H_0(t - t_0)\right]U(t) \tag{37}$$

the corresponding matrix elements of $\tilde{U}(t)$ between the eigenstates of the invariant satisfies

$$\begin{aligned} \langle\phi_k(t)|\tilde{U}(t)|\phi_{k_0}(t_0)\rangle &= \langle\phi_k(t)|\exp\left[\frac{i}{\hbar}H_0(t - t_0)\right]|\phi_{k_0}(t_0)\rangle \\ &\times \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t\langle\delta\phi_k(t_0)|H(t_0)|\phi_{k_0}(t_0)\rangle dt'\right] \\ &\times \exp\left[\int_{t_0}^t\langle\delta\phi_k(t')|i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}|\phi_{k_0}(t')\rangle dt'\right], \end{aligned} \tag{38}$$

where use has been made of

$$e^{\frac{iv}{\hbar}p(t'-t_0)}H(t')e^{-\frac{iv}{\hbar}p(t'-t_0)} = H(t_0). \tag{39}$$

If we assume that in the infinite past we start with the plane wave state

$$\Phi_k(x, t \rightarrow -\infty) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$$

then the initial and final eigenstates of the invariant $|\phi_k(|t \rightarrow \infty)\rangle$ are identical and satisfy the eigenvalues equation of the free Hamiltonian H_0 , i.e.,

$$H_0|\phi_k(|t \rightarrow \infty)\rangle = E_k|\phi_k(|t \rightarrow \infty)\rangle. \tag{40}$$

By pushing the initial time into the distant past, i.e., letting $t_0 \rightarrow -\infty$, similarly $t \rightarrow \infty$ indicating that the scattering process is complete, it is clear that Eq. (38) gives the scattering matrix or S matrix

$$\begin{aligned} \exp\left\{\int_{-\infty}^{+\infty} dt'\langle\delta\phi_k(t')|i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}|\phi_{k_0}(t')\rangle\right\}\delta(k - k_0) \\ = \langle\phi_k(|t \rightarrow \infty)|S|\phi_{k_0}(|t \rightarrow \infty)\rangle. \end{aligned} \tag{41}$$

Next, we discuss the adiabatic asymptotic limit of the S matrix (41). The eigenstate of $I(t)$ becomes approximately the eigenstate of $H(t)$. It follows that if a system is initially in the eigenstate of $I(t)$ it will be in the eigenstate of $H(t)$ approximately all the time. This is what it should be in the ordinary adiabatic situation. Thus, we may obtain the S matrix as adiabatic geometric phase factor [9,11] accumulated in a cyclic adiabatic change of a quantum system.

4. The modified Pöschl–Teller potential

We now want to consider the specific case of the modified Pöschl–Teller potential

$$H'(x, t) = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m(\cosh\{k_1[x - vt]\})^2}, \tag{42}$$

which controls, with the Morse potential, the chemical and the physical properties of some molecular systems and play a dominant role in model calculations in molecular spectroscopy (even for polyatomic molecules) as well as for molecular scattering, photodissociation processes and in the theory of intra- and intermolecular energy transfer [18].

The eigenstates and eigenvalues of the invariant $I(t)$ are given by

$$\phi_k(x, t) = (ik - k_1 \tanh\{k_1[x + vt]\})\frac{e^{i(k+\frac{vm}{\hbar})x}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + ik)}, \tag{43}$$

$$\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{v^2 m}{2} \tag{44}$$

and the exact phase shift is

$$\theta_k(t) = -\frac{\hbar[k - \frac{vm}{\hbar}]^2}{2m}(t - t_0). \quad (45)$$

The general solution is therefore known to be

$$\Psi(x, t) = \int C_k \exp\left(-i\frac{\hbar[k - \frac{vm}{\hbar}]^2}{2m}(t - t_0)\right) \phi_k(x, t) dk \quad (46)$$

if we assume that in the infinite past, i.e., at $t \rightarrow -\infty$

$$\Psi(x, -\infty) = \frac{\exp[ik_0x]}{\sqrt{2\pi}} \quad (47)$$

then the appropriate initial condition for C_k is

$$C_k = \delta\left(k + \frac{vm}{\hbar} - k_0\right). \quad (48)$$

This initial condition, together with (46) leads to the solution

$$\begin{aligned} \psi_{k_0}(x, t) &= \frac{i(k_0 - \frac{vm}{\hbar}) - k_1 \tanh\{k_1[x - vt]\}}{\sqrt{2\pi}(k_1 + i(k_0 - \frac{vm}{\hbar}))} \\ &\times \exp\left[ik_0x - i\frac{\hbar[k_0 - 2\frac{vm}{\hbar}]^2}{2m}(t - t_0)\right] \end{aligned} \quad (49)$$

with the corresponding eigenvalue

$$\lambda_{k_0} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} - \hbar k_0 v. \quad (50)$$

Inserting Eq. (43) in Eq. (28) we get

$$\begin{aligned} \theta_{k_0}^G(\infty) &= \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \delta\phi_{k_0}(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi_{k_0}(t') \rangle dt \\ &= \frac{2k_1[k_0 - \frac{vm}{\hbar}]}{k_1^2 + [k_0 - \frac{vm}{\hbar}]^2}, \end{aligned} \quad (51)$$

which gives according to Eq. (41)

$$S_{k_0} = t(k_0) = \exp i\{\theta_{k_0}^G(\infty)\}, \quad (52)$$

where S_{k_0} is the eigenvalue of the unitary S matrix. This result expresses the geometric aspect of the S matrix and represents the transmission amplitude $t(k_0)$.

In order to compare with Berry's results we shall take the adiabatic limit of our problem. In this respect we define the adiabatic limit of the above expressions by ignoring the term proportional to the speed, i.e., considering the speed as a small parameter $v \rightarrow 0$. Thus we can find the adiabatic generalized geometric phase as

$$\theta_{k_0}^G(\infty) = \frac{2k_1 k_0}{k_1^2 + k_0^2}, \quad (53)$$

which is exactly the same result obtained in [10,11] representing the transmission amplitude $t(k)$ (diagonal element of the S matrix).

5. Conclusion

In conclusion, we have presented a derivation of the exact quantum evolution, valid in the original formulation for the discrete spectra, for the case when the underlying spectrum is continuous. We have based our discussion on the use of Weyl eigendifferentials which in some sense "technically discretizes" the continuous spectrum and lays the basis for transferring all the concepts known for discrete spectra to the continuous case. We have proved that a quantum system being in an eigenstate of a Lewis–Riesenfeld invariant will remain in it after the evolution. The main

result presented is the expression for the total phase acquired during the temporal evolution, in terms of eigenstates $|\phi_k(t)\rangle$ of a continuous time-dependent invariant operator. This result has no doubt a certain relevance, since it increases the general understanding on the interesting subject of the evolution in presence of a continuous spectrum. Moreover, when the invariant is periodic and has a non-degenerate spectrum, it follows easily the expressions for the geometrical contribute which is connected to the *diagonal element* of the non-adiabatic S matrix given in the terms of cyclic initial eigenstates $|\phi_k(-\infty)\rangle$ basis of a continuous time-dependent invariant operator. Our result, that can be theoretically found for any one dimensional reflectionless potential where the double degeneracy will not affect the final result (no reflection), are illustrated with the S matrix for the modified Pöschl–Teller potential. In the adiabatic limit one recovers the results obtained in [11]. Moreover scattering states in one dimension are doubly degenerate and the non-adiabatic geometrical phase should be non-abelian represented by a 2×2 matrix which is expected to be in relation with the off-diagonal elements of the scattering matrix. Work in this direction is in progress.

Acknowledgements

This work was supported by the Algerian National Agency for the Development of University Research (ANDRU) contrat No. 36/2011 of 02 May 2011.

Appendix A. The time-dependent linear potential

In order to show that the use of the eigendifferentials is not only a simple integration over the continuous variable to omit the Dirac function but are necessary to guarantee the "normalization" when the spectrum is continuous, we will discuss the physical example of "a particle in a time-dependent linear potential" which has attracted considerable interest in the literature [19]. This model has the invariant operator eigenfunctions described by the Airy function which are normalized in terms of the Dirac delta function. Let us consider a quantum system subject to a spatially uniform time-dependent force described by the following Hamiltonian

$$H(t) = \frac{1}{2m}p^2 + f(t)x, \quad (54)$$

where $f(t)$ is a time-dependent function. We look for the invariant of the form

$$I(t) = a(t)p^2 + b(t)p + c(t)x + d(t). \quad (55)$$

The invariant equation (7) is satisfied if the time-dependent coefficients are such that

$$a = a_0, \quad (56)$$

$$b = 2a_0 \int_0^t f dt' - c_0 \int_0^t \frac{1}{m} dt' + b_0, \quad (57)$$

$$c = c_0, \quad (58)$$

$$\begin{aligned} d &= 2a_0 \int_0^t f \int_0^{t'} f dt' dt'' - c_0 \int_0^t f \int_0^{t'} \frac{1}{m} dt' dt'' \\ &+ b_0 \int_0^t f dt' + d_0, \end{aligned} \quad (59)$$

where a_0 , b_0 , c_0 and d_0 are arbitrary real constants. We can choose $a_0 = 1$ and $d_0 = 0$ without loss of generalities. The eigenstates

of $I(t)$ corresponding to time-independent eigenvalues k are the solutions of the equation

$$\left[-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - i\hbar b \frac{\partial}{\partial x} + c_0 x + d\right] \phi_k(x, t) = k \phi_k(x, t). \tag{60}$$

The key point of our analysis is to perform the time-dependent unitary transformation such that

$$\Phi_k(x) = \mathcal{E}(t) \phi_k(x, t), \tag{61}$$

where a time-dependent unitary operator $\mathcal{E}(t)$ is given by

$$\mathcal{E}(t) = \exp\left(i \frac{1}{\hbar c_0} \left(\frac{b^2}{4} - d\right) p\right) \times \exp\left(i \frac{b}{2\hbar} x\right). \tag{62}$$

It can be easily shown that, under this transformation, the coordinate and momentum operators change according to

$$x \longrightarrow \mathcal{E}(t) x \mathcal{E}(t)^+ = x + \frac{1}{c_0} \left(\frac{b^2}{4} - d\right), \tag{63}$$

$$p \longrightarrow \mathcal{E}(t) p \mathcal{E}(t)^+ = p - \frac{b}{2}. \tag{64}$$

The importance of the transformation $\exp(-i \frac{1}{\hbar c_0} (\frac{b^2}{4} - d) p)$ is that its action on a wave function in the x representation reads

$$\exp\left(-i \frac{1}{\hbar c_0} \left(\frac{b^2}{4} - d\right) p\right) F(x, t) = F\left[x - \frac{1}{c_0} \left(\frac{b^2}{4} - d\right), t\right]. \tag{65}$$

Hence, the operator I changes into time-independent operator $I_0 = \mathcal{E} I \mathcal{E}^+ = p^2 + c_0 x$. In other words, the eigenvalue equation (60) for the transformed invariant operator can be simply represented in the form of Airy equation

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial Z^2} - Z\right] \Phi_k(Z) = 0, \tag{66}$$

where we have introduced a new variable Z related to x through the relation $Z = \left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(x - \frac{k}{c_0}\right)$. The solution of the fundamental one-dimensional ordinary second-order differential equation (66) is well known

$$\Phi_k(x) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{c_0 \hbar^4}\right)^{\frac{1}{6}} Ai\left(\left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left[x - \frac{k}{c_0}\right]\right), \tag{67}$$

$Ai(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda x} e^{i\lambda^3} d\lambda$ being the integral representation of the Airy function. It is easy to verify that $\langle \Phi_{k'} | \Phi_k \rangle = \delta(k - k')$.

Reversing the above procedure, we can obtain the invariant's eigenfunctions as

$$\phi_k(x, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{c_0 \hbar^4}\right)^{\frac{1}{6}} \exp\left[-i \frac{b}{2\hbar} x\right] \times Ai\left(\left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left[x - \frac{1}{c_0} \left(\frac{b^2}{4} + k - d\right)\right]\right). \tag{68}$$

There remains the problem of finding the phases $\theta_k(t)$ which satisfies

$$\dot{\theta}_k(t) = \langle \delta \phi_k | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \phi_k \rangle, \tag{69}$$

where

$$\dot{\theta}_k^D(t) = -\langle \delta \phi_k | H(t) | \phi_k \rangle \tag{70}$$

is the dynamical phase and

$$\dot{\theta}_k^G(t) = \langle \delta \phi_k | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi_k \rangle \tag{71}$$

is the geometrical phase.

Evaluating $\langle \phi_{k'} | H(t) | \phi_k \rangle$, $\langle \phi_{k'} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi_k \rangle$ and using (61)–(65) we find

$$\begin{aligned} \langle \phi_{k'} | H(t) | \phi_k \rangle &= \left[-\frac{c_0^2 \hbar^2}{2m} + f(t) c_0 \hbar^2\right] \delta''(k' - k) + \frac{b i \hbar c_0}{2m} \delta'(k' - k) \\ &+ \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{b^2}{4}\right) + \frac{f(t)}{c_0} \left(k + \frac{b^2}{4} - d\right)\right] \delta(k' - k), \end{aligned} \tag{72}$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_{k'} | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \phi_k \rangle &= c_0 \hbar^2 \frac{\dot{b}}{2} \delta''(k' - k) - i\hbar \left(\frac{b\dot{b}}{2} - \dot{d}\right) \delta'(k' - k) \\ &+ \frac{b^2}{4} + k - d \frac{\dot{b}}{c_0} \delta(k' - k) \end{aligned} \tag{73}$$

and the sum of (72) and (73) is

$$\begin{aligned} \langle \phi_k(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \phi_{k'}(t) \rangle &= \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}} \delta^{(2)}(k' - k) - \frac{i\hbar b}{2m} \left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \delta^{(1)}(k' - k) \\ &- \frac{1}{2m} \left[k' + \frac{b^2}{2} - d\right] \delta(k' - k). \end{aligned} \tag{74}$$

As mentioned before, one finds that (72)–(74) are proportional to delta function and its derivatives. It's clear that if $k' = k$ the expressions (72)–(74) diverge and Eq. (74) can be written as

$$\begin{aligned} \langle \phi_k(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \phi_k(t) \rangle &= \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{2}{3}} \delta^{(2)}(0) - \frac{i\hbar b}{2m} \left(\frac{c_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \delta^{(1)}(0) \\ &- \frac{1}{2m} \left[k + \frac{b^2}{2} - d\right] \delta(0) \propto \infty. \end{aligned} \tag{75}$$

If we now apply the eigendifferentials we find a finite result

$$\langle \delta \phi_k(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \phi_k(t) \rangle = -\frac{1}{2m} \left[k + \frac{b^2}{2} - d\right], \tag{76}$$

which give a total phase shift

$$\theta_k(t) - \theta_k(0) = -\frac{1}{2m} \int_0^t \left[k + \frac{b^2}{2} - d\right] dt'. \tag{77}$$

References

[1] M.V. Berry, Proc. R. Soc. A 392 (1984) 45.
 [2] B. Simon, Phys. Rev. Lett. 51 (1983) 2167.
 [3] F. Wilczek, A. Zee, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 2111.
 [4] Y. Aharonov, J. Anandan, Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 1593.
 [5] H.R. Lewis, W.B. Riesenfeld, J. Math. Phys. 10 (1969) 1458.
 [6] J. Samuel, R. Bhandari, Phys. Rev. Lett. 60 (1988) 2339.
 [7] N. Mukunda, R. Simon, Ann. Phys. 228 (1993) 205;
 N. Mukunda, R. Simon, Ann. Phys. 228 (1993) 269.
 [8] D.A. Morales, J. Phys. A: Math. Gen. 21 (1988) L889.
 [9] R.G. Newton, Phys. Rev. Lett. 72 (1994) 954.
 [10] G. Ghosh, Phys. Lett. A 210 (1996) 40.
 [11] M. Maamache, Y. Saadi, Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 150407;
 M. Maamache, Y. Saadi, Phys. Rev. A 78 (2008) 052109.
 [12] A. Messiah, Quantum Mechanics, North-Holland, 1962.
 [13] W. Greiner, Quantum Mechanics: An Introduction, Springer, 2000.
 [14] H.D. Liu, X.X. Yi, Phys. Rev. A 84 (2011) 022114.
 [15] J.G. Hartley, J.R. Ray, Phys. Rev. A 25 (1982) 2388.
 [16] Xiao-Chun Gao, Jing-Bo Xu, Tie-Zheng Qian, Phys. Rev. A 44 (1991) 7016;
 Jeong Ryeol Choi, Int. J. Mod. Phys. B 18 (2004) 1007;
 I.A. Pedrosa, Alexandre Rosas, Phys. Rev. Lett. 103 (2009) 010402.
 [17] L. Schwartz, Théorie des distributions, vols. 1–2, Hermann, 1950–1951.
 [18] J.S. Dehesa, A. Martinez-Finkelshtein, V.N. Sorokin, Mol. Phys. 104 (2006) 613.

- [19] M.V. Berry, N.L. Balazs, *Am. J. Phys.* 47 (1979) 264;
A. Rau, K. Unnikrishnan, *Phys. Lett. A* 222 (1999) 304;
I. Guedes, *Phys. Rev. A* 63 (2001) 034102;
M. Feng, *Phys. Rev. A* 64 (2001) 034101;
J. Bauer, *Phys. Rev. A* 65 (2002) 036101;
D.-Y. Song, *Europhys. Lett.* 62 (2003) 622;
H. Bekkar, F. Benamira, M. Maamache, *Phys. Rev. A* 68 (2003) 016101;
P.-G. Luan, C.-S. Tang, *Phys. Rev. A* 71 (2005) 014101;
J. Dunkel, S.A. Trigger, *Phys. Rev. A* 71 (2005) 052102;
G.E. Bowman, *J. Phys. A* 39 (2006) 157;
S.P. Kim, *Korean J. Phys. Soc.* 44 (2006) 464;
G. Lu, W. Hai, L. Cai, *Phys. Lett. A* 357 (2006) 181;
C.-L. Lin, T.-C. Hsiung, M.-J. Huang, *Europhys. Lett.* 83 (2008) 30002;
L. Krache, M. Maamache, Y. Saadi, A. Beniaiche, *Chin. Phys. Lett.* 26 (2009) 070307;
L. Krache, M. Maamache, Y. Saadi, *Int. J. Theor. Phys.* 49 (2010) 936.

Time Dependent Systems with Continuous Spectra: Some Applications

Y. Saadi^a and M. Maamache^a

^a*Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques,
Faculté des Sciences, Université Ferhat Abbas de Sétif, Sétif 19000, Algeria.*

Abstract. We present some concrete applications to the recent results obtained for the study of time dependent systems involving continuous spectra. Before doing, a brief recall of these results is provided.

Keywords: Time dependent systems, adiabatic approximation, geometric phase, Lewis-Reisenfeld theory, invariant, continuous spectrum.

PACS: 03.65.Ca, 03.65.Nk, 03.65.Ta, 03.65.Vf

INTRODUCTION

The study of time dependent systems is of a great interest in both classical and quantum physics. In quantum mechanics, a time dependent system is a system described by the Schrödinger equation

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

where the Hamiltonian depends explicitly on a set of time dependent parameters due to some external fields

$$H(t) = H(X_1(t), X_2(t), \dots, X_i) \quad (2)$$

Finding analytical solutions to Eq.1 is the main purpose of the time dependent systems methods! In fact, solving the time dependent Schrödinger equation is not always an obvious thing. All the resolution methods resemble each other in the fact that they are either formal or they are applicable only for limited cases hence the recourse towards the approximation methods is an inevitable choice in physics.

The adiabatic approximation, proposed by M. Born and V. Fock [1], is actually one of the most important methods especially after the discovery of the geometrical phases by M. V. Berry [2] and all the generalization achieved since 1983 [3]. The application of the adiabatic theorem knew a great interest in the various fields of physics: The Landau-Zener transition in molecular physics, the quantum field theory, the quantum electrodynamics, nuclear and chemical physics, quantum Hall effect, quantum computation, geometrical phases.

In 1969 Lewis and Reisenfeld [4] proposed a formal method to find exact solutions to the time dependent Schrödinger equation. The main idea is to find an invariant; i.e. an hermitian operator satisfying the Liouville-Von Neumann equation. The solution of Eq.1 is nothing but the eigenfunction of this invariant up to a certain phase.

Most of the works on both adiabatic approximation and the invariant theory are confined to discrete spectra. In the following work, after providing a short recall on the last works on time dependent systems for continuous spectra, we will apply them on some physical problems namely: Dirac equation with time dependent electromagnetic field, geometrical aspect of the S matrix, scattering by the Modified Pöschl-Teller potential.

TIME DEPENDENT SYSTEMS WITH CONTINUOUS SPECTRA

The validity condition of the adiabatic approximation is written:

$$\left| \frac{\langle \varphi_k^H(t) | \hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_k^H(t) \rangle}{E_k(t) - E_n(t)} \right| \ll 1, \quad k \neq n \quad (3)$$

where the superscript H always refers to the eigenvectors of the Hamiltonian. The existence of the gap is a necessary condition to ensure the smoothness of the projectors and the width of the gap makes it possible to fix the least value of the adiabatic parameter T . In the case of a continuous spectrum $E_k(t) - E_n(t) \rightarrow 0$. Unlike the adiabatic theorem, the use of the invariants theory doesn't depend on any validity condition. But, its application in the literature was confined to discrete spectra! In the few papers dealing with continuous spectra, the generalization was done like an ansatz which led to erroneous result [5]. The problem is that the distribution

$$\langle \varphi_k^I(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \varphi_k^I(t) \rangle \propto \infty \quad (4)$$

where the superscript I always refers to the eigenvectors of the invariant. In fact

$$\text{supp} \left(\langle \varphi_{k'}^I(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \varphi_k^I(t) \rangle \right) = \{k'\} \quad (5)$$

which is equivalent to

$$\langle \varphi_{k'}^I(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \varphi_k^I(t) \rangle = \sum_n \Gamma_n(k) \delta^{(n)}(k - k') \quad (6)$$

In a very recent works [6], and by using the definitions

$$|\delta\varphi_k(t)\rangle = \int_k^{k+\delta k} |\varphi_{k'}(t)\rangle dk' \quad (7)$$

$$\delta P_k(t) = \int_k^{k+\delta k} |\varphi_{k'}(t)\rangle \langle \varphi_{k'}(t)| dk' \quad (8)$$

We have showed that, for continuous spectra, the adiabatic and the invariants theories are governed, respectively, by

$$\lim_{T \rightarrow \infty} U(t, t_0) \delta P_k^H(t_0) = \delta P_k^H(t) \lim_{T \rightarrow \infty} U(t, t_0) \quad (9)$$

$$U(t, t_0) \delta P_k^I(t_0) = \delta P_k^I(t) U(t, t_0) \quad (10)$$

The particular solution of the Schrödinger equation with continuous spectrum is then given by

$$|\psi_k(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \alpha_k(t)} |\varphi_k^?(t)\rangle, \quad ? = H, I \quad (11)$$

For the adiabatic case

$$\alpha_k(t) = \int \langle \delta\varphi_k^H(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi_k^H(t') \rangle dt' - \int E_k(t') dt' \quad (12)$$

For the non adiabatic case

$$\alpha_k(t) = \int \langle \delta\varphi_k^I(t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} - H(t') | \varphi_k^I(t') \rangle dt' \quad (13)$$

APPLICATIONS

Dirac Equation With Time Dependent Electromagnetic Field

Let us consider the adiabatic time dependent Dirac Hamiltonian

$$H_D(t) = c\alpha^3 \left[p - \begin{pmatrix} f(t) & 0 \\ 0 & f^*(t) \end{pmatrix} \right] + \beta m(t)c^2 \quad (14)$$

where $f(t) = f_R(t) + if_I(t)$ is a complex time dependent function. Using the spinorial basis, one finds the following phase after one period T

$$\alpha_k^\pm(t_0 + T) = \hbar c^2 \oint_C \frac{f_I(t)^2 d\left(\frac{f_R(t)}{f_I(t)}\right) + k_0 df_I(t)}{[m(t)c^2 - E^\pm(k,t)]^2 + |g(k,t)|^2 c^2} \quad (15)$$

corresponding to the eigenvectors

$$\varphi_k^\pm(t) = \left\{ \frac{c\sigma_3 g(k,t)|1\rangle + (m(t)c^2 - E^\pm(k,t))|2\rangle}{\sqrt{[m(t)c^2 - E^\pm(k,t)]^2 + |g(k,t)|^2 c^2}} \right\} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{z}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (16)$$

where $E^\pm(k, t) = \pm c\sqrt{m(t)^2 c^2 + |g(k, t)|^2}$. To visualize the geometrical aspect of the previous phase, using the spherical coordinates $f_R + k = \frac{1}{c} E^\pm(k) \sin(\theta) \cos(\varphi)$, $f_I = \frac{1}{c} E^\pm(k) \sin(\theta) \sin(\varphi)$ and $mc = \frac{1}{c} E^\pm(k) \cos(\theta)$ one finds the solid angle

$$\alpha_k^\pm(t_0 + T) = -\frac{\hbar}{2} c^2 \oint_C (1 + \sin(\theta)) d\varphi \quad (17)$$

If one passes to the non relativistic limit

$$H^{NR}(t) = \frac{[p - eA(t)]^2}{2m} + eV(t) \quad (18)$$

where $eV(t) = \frac{f_I(t)^2}{2m(t)}$ and $eA(t) = f_R(t)$ one finds $\alpha_k^\pm(t_0 + T) \rightarrow 0$.

The Time Dependent Linear Potential

Let us consider the following Hamiltonian

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + f(t).x \quad (19)$$

where $f(t)$ is a time-dependent function. We look for the invariant of the form

$$I(t) = a(t)p^2 + b(t)p + c(t).x + d(t) \quad (20)$$

we find $a = a_0$, $c = c_0$, $b = 2a_0 \int_0^t f dt' - c_0 \int_0^t \frac{1}{m} dt' + b_0$ and $d = \int_0^t f b dt' + d_0$.

We can choose $a_0 = 1$ and $d_0 = 0$ without loss of generality. The total phase corresponding to the eigenvectors

$$\varphi_k(x, t) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{c_0 \hbar^4} \right)^{\frac{1}{6}} e^{-i\frac{b}{2\hbar}x} Ai \left[\left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[x - \frac{1}{c_0} (b^2/4 + k - d) \right] \right] \quad (21)$$

is then given by

$$\alpha_k(t) = \frac{-1}{2m} \int_0^t \left(\frac{b^2}{2} + k - d \right) dt' \quad (22)$$

We can easily see that Eq.21 verifies Eq.6, indeed

$$\langle \varphi_{k'}(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \varphi_k(t) \rangle = \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \delta^{(2)}(k - k') - \frac{i\hbar b}{2m} \left(\frac{c_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \delta^{(1)}(k - k') - \frac{1}{2m} (b^2/2 + k - d) \delta(k - k') \quad (23)$$

The Geometrical Aspect of the S Matrix

One of the main applications of these new results is the geometrical aspect of the scattering matrix. The question was raised for the first time by R. G. Newton (1995) [7] for the adiabatic scattering problems. Since the scattering problems involve continuous spectra, we've used the results given previously to show this propriety for both adiabatic and non adiabatic cases. Let us consider the following problem

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (24)$$

$$H'(t) = \begin{cases} 0 & |t| \gg t_0 \\ V(t) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (25)$$

In the interaction picture, The two formulas governing both adiabatic and invariants theories (Eqs. 9 and 10) for continuous spectra give

$$\langle \varphi_k^?(t) | \tilde{U} | \varphi_{k_0}^?(t_0) \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} \alpha_{k_0}(t)} \left\langle \varphi_k^?(t) \left| e^{\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_0)} \right| \varphi_{k_0}^?(t_0) \right\rangle, \quad ? = H, I \quad (26)$$

for a free incident particle. By passing to the limits $t \rightarrow \infty$, $t_0 \rightarrow -\infty$ we find

$$\langle \varphi_k^0 | S | \varphi_{k_0}^0 \rangle = e^{\int \langle \delta \varphi_k^?(t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi_k^?(t') \rangle dt'} \delta(k - k_0), \quad ? = H, I \quad (27)$$

On the basis of this comparison we may conclude that after the Hamiltonian completes a closed curve from H_0 via $H'(t)$ back to H_0 , the state which initially was given by $|\varphi_{k_0}^0\rangle$ has gone over into a new state that differs from it by a unitary transformation

$$S |\varphi_k^0\rangle = s_k |\varphi_k^0\rangle \quad (28)$$

where the eigenvalue of the unitary S matrix is related to the generalized geometrical phase by

$$s_k = t(k) = e^{\int \langle \delta \varphi_k^?(t') | \frac{\partial}{\partial t'} | \varphi_k^?(t') \rangle dt'}, \quad ? = H, I \quad (29)$$

We note here that this result is ensured by the adiabatic theorem itself in the case of adiabatic evolutions, which is not the same thing for the invariants theory in which the use of the Aharonov-Anandan phase is very necessary.

Scattering by the Modified Pöschl-Teller Potential

To illustrate the previous result, let us consider the MPT potential

$$V(x, t) = -\frac{\hbar^2 k_1^2}{m \cdot ch [k_1(x-vt)]^2} \quad (30)$$

The time independent problem admits an exact transmission amplitude

$$t(k) = \frac{-k_1 + ik}{k_1 + ik} = e^{2iatan\left(\frac{k_1}{k}\right)} = e^{i\delta} \quad (31)$$

This problem was studied for a general function of time $x_0(t)$, which we've taken here $x_0(t) = v \cdot t$ for reasons of simplicity. The invariant corresponding to the system is found to be

$$I(t) = H_0 + V(t) + vp \quad (32)$$

corresponding to the eigenstates

$$\varphi_k(x, t) = (ik - k_1 \tanh\{k_1[x + vt]\}) e^{i\left(k + \frac{v \cdot m}{\hbar}\right)x} / \sqrt{2\pi(k_1 + ik)} \quad (33)$$

Far at $t \rightarrow \infty$ the geometrical phase is

$$\alpha_k(\infty) = \left(2k_1 \left[k - \frac{v.m}{\hbar}\right]\right) / k_1^2 + \left[k - \frac{v.m}{\hbar}\right]^2 \quad (34)$$

The same system was studied in the adiabatic case where we've found

$$\alpha_k(\infty) = \frac{2k_1 k}{k_1^2 + k^2} \quad (35)$$

which corresponds exactly to $v \rightarrow 0$.

REFERENCES

1. M. Born and V. Fock, *Z. Phys.* **51**, 165-180 (1928).
2. M. V. Berry, *Proc. R. Soc. A* **392**, 45-57 (1984).
3. F. Wilczek and A. Zee, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2111-2114 (1984); Y. Aharonov and J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.* **58** 1593-1596 (1987); J. Samuel and R. Bhandari, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2339-2342 (1988); N. Mukunda and R. Simon, *Ann. Phys.* **228**, 205-268 (1993); R. Simon and N. Mukunda, *Ann. Phys.* **228**, 269-340 (1993).
4. H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, *J. Math. Phys.* **10** 1458-1473 (1969).
5. X.C. Gao, J.-B. Xu and T.Z. Qian, *Phys. Rev. A* **44**, 70167021(1991), J. R. Choi, *Int. Jour. Mod. Phys.* **B18**, 1007-1020 (2004), I. A. Pedrosa and Alexandre Rosas, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 010402 (2009).
6. M. Maamache and Y. Saadi, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 150407 (2008); *Phys. Rev. A* **78**, 052109 (2008).
7. R. G. Newton, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 954-956 (1994).

Résumé :

Depuis leurs découvertes, l'application des phases géométriques a été limitée aux cas des spectres discrets. Dans ce travail, cette notion sera généralisée aux cas des systèmes quantiques ayant des spectres continus pour les deux cas adiabatique et non-adiabatique. Ces deux résultats sont la conséquence directe de la généralisation du théorème adiabatique et la théorie des invariants, respectivement. Parmi les conséquences importantes des résultats obtenus, on peut citer la démonstration de l'aspect géométrique de la matrice S pour n'importe quel type d'évolution. Des exemples d'illustration seront donnés à la fin du travail.

Mots-clés : La théorie des invariants, la théorie de Lewis et Riesenfeld, équation de Liouville-Von Neumann, approximation adiabatique, théorème adiabatique, gap d'énergie, spectre discret, spectre continu, différentielles propres, phase de Berry, phase géométrique, matrice S.

Abstract :

Since their discovery, the application of the geometric phases has been limited to the case of discrete spectra. In this work, this notion will be generalized to the case of quantum systems with continuous spectra for both adiabatic and non-adiabatic evolutions. These two results are the direct consequence of the generalization of the adiabatic theorem and the invariants theory, respectively. Among the important consequences of the obtained results, we have the demonstration of the geometrical aspect of the S matrix for any kind of time evolution. Illustrative examples are given at the end of the work.

Keywords: the invariants theory, the Lewis and Riesenfeld theory, the Liouville-Von Neumann equation, adiabatic approximation, adiabatic theorem, energy's gap, discrete spectrum, continuous spectrum, eigendifferentials, Berry's phase, geometric phase, S-matrix.

المخلص:

منذ اكتشافها، اقتصر تطبيق مفهوم الأطوار الهندسية لحالة الأطياف المنفصلة. في هذا العمل، سيتم تعميم هذا المفهوم لحالة نظم الكم ذات الأطياف المستمرة لكل من التغيرات الزمنية الكاظمية و غير الكاظمية. هذه التعميمات هي نتيجة مباشرة لتعميم نظرية التغيرات الكاظمية ونظرية اللامتغيرات على التوالي. من بين التطبيقات الهامة لنتائج هذا العمل نذكر برهان الطبيعة الهندسية لمصفوفة الانتشار مهما كانت طبيعة التطور الزمني. سيتم إعطاء أمثلة توضيحية في نهاية العمل.

الكلمات المفتاحية: نظرية اللامتغيرات، نظرية لويس و ريزنفيلد، معادلة ليوفيل و فان نيومن، التقريب الكاظم، النظرية الكاظمية، فجوة الطاقة، الطيف المنقطع، الطيف المستمر، التفاضلات الذاتية، طور بيرري، الطور الهندسي، مصفوفة الانتشار.