

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

Université Ferhat Abbas de SETIF

Faculté des Sciences

Département de Physique

THESE

Présentée pour obtenir le diplôme de

Doctorat ès sciences

Option : **Physique théorique**

Par

Salah MENOUAR

T H E M E

Contribution à la solution de certains problèmes dépendants du temps

Soutenu le : 06/07/2009

Devant le jury composé de :

Mr. K. Bencheikh	Prof. Univ. Sétif	Président
Mr. M. Maamache	Prof. Univ. Sétif	Rapporteur
Mr. F. Benamira	Prof. Univ. Constantine	Examineur
Mr. A. Bounames	Prof. Univ. Jijel	Examineur
Mr. Kh. Nouicer	Prof. Univ. Jijel	Examineur
Mr. H. Bekkar	M.C.A. Univ. Sétif	Examineur

Remerciements

Ce travail de thèse a été effectué au département de Physique de l'université Ferhat Abbas de Sétif, sous la direction du Professeur Mustapha Maamache, Doyen de la Faculté des sciences. Je tiens à lui d'exprimer ma reconnaissance et mes remerciements pour m'avoir constamment guidé et conseillé tout au long de la réalisation de cette thèse. Monsieur le Professeur M. Maamache, a joué un rôle déterminant dans ma formation scientifique et académique. Il m'a appris l'importance d'être un scientifique honnête et cultivé. J'apprécie ses connaissances profondes, sa grande disponibilité et sa patience.

Mes remerciements vont également à tous les membres du jury :

Monsieur le Professeur K. Bencheikh de l'université de Ferhat Abbas de Sétif qui a bien voulu présider ce jury.

Messieurs les Professeurs : F. Benamira de l'université de Constantine, A. Bounames et Kh. Nouicer de l'université de Jijel et le Docteur H. Bekkar de l'université de Sétif pour m'avoir honorer de leur participation à ce jury.

Je tiens à remercier le Docteur Jeong Royel Choi de La Corée pour sa collaboration et ses discussions riches dans le domaine des systèmes dépendants du temps.

Je tiens à remercier tous les membres du groupe de recherche du professeur M. Maamache et tous mes collègues et amis du laboratoire d'optoélectronique.

J'adresse aussi un remerciement spécial à mon collègue du tronc-commun monsieur : O. Guamoura pour leur soutien.

Ainsi qu'à tous les enseignants qui, par leur enseignement, leur encouragement et leur aide, ont contribué à ma formation durant tous mes études dès le primaire à l'université.

DEDICACES

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

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

Je le dédie à mon frère l'avocat le maître Abdelmalek pour leur soutien moral et solidarité.

Je le dédie à ma petite famille ma femme Farida, et mes fleurs de vie mes fils : Mohamed Amine, Khaled et Abdelmounaim pour leurs encouragements et leurs aides.

Ainsi qu'à mes sœurs Souhila, Farida, Razika et Fatima et la femme de mon frère Hadjira et ton fils Bassem Abdelaziz et je les remercie pour leurs encouragements.

A toutes les familles de Menouar, Guara, Barhoum, Boukabas, Bougandoura, Touahra, Samai, Bouguerche, Ben yahia.

A tous mes amis sans citer les noms.

A mes collègues de l'université de Sétif sans citer les noms.

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

Salah

Tables des matières

0. Introduction	6
1. Equation de Schrödinger dépendante du temps :	
Méthodes et concepts	8
1.1 Introduction.....	8
1.2 Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.....	10
1.2.1 Transformations unitaires.....	10
1.2.2 Opérateur d'évolution.....	12
1.2.3 Changement de représentation.....	13
1.3 Le recours vers les méthodes approximatives.....	14
1.3.1 La théorie des perturbations dépendant du temps.....	14
1.3.2 Approximation soudaine.....	16
1.3.3 L'approximation adiabatique.....	16
1.4 Phase de Berry.....	16
1.4.1 Définition de la Phase de Berry.....	17
1.4.2 Interprétation physique de la phase de Berry.....	20
1.4.3 Généralisations non adiabatiques.....	22
2. La théorie des invariants et les systèmes dépendants du temps	25
2.1 Introduction.....	25
2.2 Intégrales de mouvement.....	25
2.3 Théorème de Liouville et l'invariant mécanique.....	27
2.4 L'analogie quantique de l'équation de Liouville.....	30
2.5 Relation invariant de Lewis-Riesenfeld et solution de l'équation de Schrödinger.....	31

3. Solution exacte de l'équation de Schrödinger pour le potentiel coulombien dépendant du temps	36
3.1 Introduction.....	36
3.2 Construction de l'invariant.....	37
3.3 Valeurs et états propres de l'invariant.....	40
3.4 Calcul de la phase totale et la solution de l'équation de Schrödinger.....	45
3.5 Applications et discussion.....	46
4. Solution exacte de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur singulier plus le terme $(1/x)p+p(1/x)$	49
4.1 Introduction.....	49
4.2 Construction de l'invariant.....	50
4.3 Valeurs et états propres de l'invariant.....	52
4.4 Calcul de la phase totale et la solution de l'équation de Schrödinger.....	55
Conclusion	58
 Annexe	 59
- Polynômes de Laguerre	
 Bibliographie	 62

Introduction

Les problèmes des systèmes dépendants explicitement du temps sont difficiles à résoudre avec exactitude. Plusieurs méthodes ont été exploitées pour résoudre de tels problèmes, parmi lesquels la méthode des perturbations dépendants du temps, l'approximation soudaine et l'approximation adiabatique. Bien que ces dernières ne donnent pas des solutions analytiques exactes, elles sont généralement très puissantes et applicables à de nombreux systèmes physiques.

La phase géométrique ou phase de Berry [1] a suscité un intérêt considérable ces dernières années, car elle apporte un complément très important au théorème adiabatique [2] qui stipule qu'un système initialement dans un état stationnaire non dégénéré, repéré par un ensemble donné des nombres quantiques, restera dans un état spécifié par les mêmes nombres quantiques lors d'une évolution adiabatique.

La phase de Berry apparaît également pour des évolutions autres qu'adiabatiques, la théorie des invariants (ou de Lewis et Riesenfeld) [3] constitue une méthode puissante pour l'étude des phases géométriques ainsi que la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Plusieurs études sur des invariants du mouvement pour des classes de potentiels particuliers ont été faites : citons par exemple l'oscillateur harmonique généralisé et l'oscillateur singulier [4-21], la particule libre dans un potentiel linéaire [22-25], le système à deux niveaux [26], la particule chargée dans un champ magnétique [3, 27-29]. Pour des systèmes plus complexes, la recherche d'un tel invariant s'avère toujours une tâche difficile qui continue à constituer l'un des domaines de recherche actifs en physique théorique. En effet, la théorie des invariants représente une méthode globale permettant la résolution exacte des problèmes des systèmes mécaniques dépendants du temps, et en particulier la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Ce succès de la théorie des invariants nous a motivé à l'exploiter dans l'étude de deux modèles physiques très intéressants, le modèle du potentiel coulombien qui a mérité toute notre attention car nous avons inclus la dépendance en temps du potentiel coulombien avant de le solutionner par la méthode des invariants, les résultats obtenus ont fait l'objet

d'une publication [30].

D'autre part, le modèle de l'oscillateur harmonique en physique peut intervenir dans la description de nombreux phénomènes (en physique des solides ; en électromagnétisme ; en physique atomique ; en physique nucléaire...etc.) et ses caractéristiques (énergies et états propres) représentent l'objet d'étude de tout ces phénomènes observés. Un modèle que nous étudions est celui de l'oscillateur singulier plus le terme $(1/x)p + p(1/x)$, et qui a fait l'objet d'un article critique [31] sur un article publié par un autre auteur [32], où on présente une méthode simple pour construire l'invariant en utilisant les générateurs du groupe de Lie $SU(1, 1)$.

Avant d'aborder le sujet, on va d'abord faire un bref rappel sur l'équation de Schrödinger et la théorie des invariants aux chapitres I et II.

Le troisième chapitre présente l'essentiel de notre travail concernant la solution de l'équation de Schrödinger d'une particule plongée dans un potentiel coulombien dépendant du temps $V(x, t) = -Z(t)/x$.

Au quatrième chapitre, nous allons s'intéresser à la solution exacte de l'équation de Schrödinger pour un hamiltonien dépendant du temps comprenant un oscillateur singulier plus un terme $(1/x)p + p(1/x)$.

Un appendice sur les polynômes de Laguerre termine cette thèse.

Chapitre 1

Equation de Schrödinger dépendante du temps : Méthodes et concepts

1.1 Introduction

Le grand moment historique de la naissance de la description quantique de la matière s'est produit lorsque Schrödinger¹ a écrit pour la première fois son équation. Pendant de longues années, la structure atomique interne de la matière était restée un grand mystère. Dans le cadre de la mécanique classique, l'état d'un système physique est bien défini par la connaissance des variables dynamiques du système, solutions des équations de Newton ou celles de Hamilton et Lagrange, qui sont des quantités continues d'où la continuité des grandeurs qui déterminent l'état du système tel que l'énergie [33-34]. Alors pour ce faire, il fallait d'abord trouver l'analogue des équations de la mécanique classique, une telle équation, qui ne peut pas être directement déduite d'une manière rigoureuse des anciens principes, mais intuitivement devinée [35] sera l'un des postulats de la théorie, cette équation c'est celle qu'on appelle aujourd'hui l'équation de Schrödinger.

La découverte par Schrödinger des équations propres du mouvement des électrons

¹En 1926, le physicien autrichien Schrödinger proposait une équation pour trouver la fonction d'onde d'un système.

à l'échelle atomique a fourni une théorie à partir de laquelle on peut étudier des phénomènes atomiques de façon quantitative, précise et détaillée. En principe, l'équation de Schrödinger permet d'expliquer tous les phénomènes atomiques sauf ceux qui font intervenir le magnétisme² et la relativité³.

La mécanique quantique postule qu'à un instant t_0 fixé, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un ket (vecteur d'état) $|\psi(t_0)\rangle$ appartenant à l'espace des états d'Hilbert ε . En outre l'évolution dans le temps du vecteur d'état⁴ $|\psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.1)$$

où $H(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système (l'opérateur hamiltonien du système). Celle-ci peut dépendre explicitement du temps.

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle du premier ordre par rapport au temps et du second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace ordinaire. Ce qui signifie que la donnée d'un état initial $|\psi(t_0)\rangle$ suffit à déterminer $|\psi(t)\rangle$ à tout instant ultérieur t . Ceci n'est valable que si l'évolution n'est pas interrompue par une mesure d'une grandeur physique du système. Cette équation est également linéaire et homogène. Ses solutions sont donc linéairement superposables [36-37]. Si $|\psi_1(t)\rangle$ et $|\psi_2(t)\rangle$ sont deux solutions de l'équation (1.1) et si l'état initial du système est défini par $c_1 |\psi_1(t_0)\rangle + c_2 |\psi_2(t_0)\rangle$, alors l'état du système au temps t est donné par $c_1 |\psi_1(t)\rangle + c_2 |\psi_2(t)\rangle$. Il existe donc une correspondance linéaire entre $|\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle$.

²Il est possible de tenir compte des effets magnétiques d'une manière approchée en ajoutant quelques termes de plus dans l'Hamiltonien.

³L'équation relativiste correcte pour le mouvement d'un électron a été découverte par Dirac une année après que Schrödinger ait proposé son équation.

⁴On désigne plus succinctement un état par la notation vectorielle $|\psi(t)\rangle$ en sous-entendant que la fonction $\psi(x, t)$ est une réalisation du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ dans la représentation des coordonnées.

1.2 Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

Différentes méthodes existent pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée. En pratique, il existe plusieurs techniques de résolutions. Le but est de trouver la solution $|\psi(t)\rangle$ correspondant à la condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$, pour cela on peut citer quelques méthodes intéressantes qui ont une relation directe avec ce qui va suivre de notre travail.

1.2.1 Transformations unitaires

Il est important de se rappeler que pour décrire l'évolution du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de Hilbert, on doit choisir un système d'axes ou un référentiel. Le choix de référentiel n'a pas de raison d'être unique, c'est-à-dire que l'on est libre de passer à un autre système d'axes. Chaque fois que l'on change de référentiel, on change de point de vue et par conséquent on observe le système physique sous un angle différent. En pratique, pour passer d'un référentiel à un autre, on utilise des opérateurs unitaires U qui peuvent être indépendants ou dépendants du temps et qui satisfont à la condition :

$$UU^+ = U^+U = 1, \quad (1.2)$$

où U^+ est l'opérateur adjoint de U . Généralement, pour un hamiltonien dépendant du temps, on utilise des opérateurs unitaires dépendants du temps qui transforment le vecteur d'état de la façon suivante [38] :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = U^{-1}(t) |\psi(t)\rangle. \quad (1.3)$$

Dans le nouveau référentiel, le nouvel hamiltonien s'écrit :

$$\tilde{H}(t) = U(t)^{-1}H(t)U(t) - i\hbar U(t)^{-1}\frac{\partial}{\partial t}U(t). \quad (1.4)$$

Le but général d'un changement de référentiel est de trouver une représentation dans laquelle l'évolution temporelle du système physique paraît la plus simple. Souvent, un changement de représentation peut nous apporter de nouvelles interprétations physiques ou des avantages techniques comme par exemple la qualité de convergence numérique d'un calcul.

Donc les transformations unitaires servent d'outils de recherche de nouvelles représentations. Par exemple, dans le nouveau référentiel, on aimerait être capable d'effectuer une séparation de variables entre la partie temporelle et la partie spatiale du vecteur d'état $|\tilde{\psi}(t)\rangle$. En d'autres termes, on cherche des opérateurs unitaires qui mettraient l'hamiltonien original $H(t)$ sous une forme factorisable, i.e. $\tilde{H}(t) = \sum_n h_n(t)T_n$ ou $\tilde{H}(t) = g(t)k$, où les T_n et k sont indépendants du temps. Dès lors, on pourrait intégrer analytiquement l'équation de Schrödinger impliquant $\tilde{H}(t)$ pour obtenir l'opérateur d'évolution temporelle dans le nouveau référentiel.

Dans cet esprit, de nombreuses études dans la littérature de physique mathématique ont porté sur la recherche ou l'identification de systèmes, surtout atomiques, qui admettent une solution exacte dans un certain type de référentiel [39,40, 77]. Efthimou et Spector ont ainsi identifié des classes de systèmes qui admettent une séparation exacte de variables espace/temps et ils ont donné aussi des transformations unitaires pour obtenir le nouveau référentiel dépendant du temps [41].

1.2.2 Opérateur d'évolution

Du fait de la correspondance linéaire entre $|\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle$, il existe un opérateur linéaire unitaire $U(t, t_0)$, tel que

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (1.5)$$

Il est clair, d'après la formule ci-dessus, que le rôle de cet opérateur est de déterminer l'évolution de l'état à tout instant, pour cette raison il est appelée *opérateur d'évolution*. Dans le cas particulièrement simple où l'hamiltonien H du système ne dépend pas du temps, l'opérateur $U(t, t_0)$ a une forme simple

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}. \quad (1.6)$$

Effectivement, en prenant la dérivée partielle par rapport au temps de la fonction (1.6) on obtient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0). \quad (1.7)$$

On note que l'équation (1.7) présente le même degré de difficulté que l'équation de Schrödinger, mais elle présente plus d'avantage lors de l'utilisation des méthodes d'approximation.

L'opérateur d'évolution total peut être ainsi décomposé en un produit d'opérateurs d'évolution temporelles infinitésimales :

$$U(t, t_0) = U(t, t_k)U(t_k, t_{k-1})\dots U(t_2, t_1)U(t_1, t_0). \quad (1.8)$$

On peut choisir t_0, t_1, \dots, t_k de telle sorte que les intervalles entre eux soient égaux. Donc $U(t, t_0)$ peut s'écrire :

$$U(t, t_0) = \prod_{i=1}^N U_i(t_i, t_i - \Delta t). \quad (1.9)$$

On en arrive à conclure que le mouvement d'un ensemble quantique peut être assimilé à

une succession de transformations unitaires.

Un cas particulier de la transformation (1.5), ayant de multiples applications dans la théorie de diffusion des particules, est celui où l'état initial est fixé non pas pour $t_0 = 0$, mais pour $t_0 = -\infty$, et l'état final $|\psi(t)\rangle$ est considéré pour $t = +\infty$; (1.5) s'écrit alors

$$|\psi(+\infty)\rangle = U(+\infty, -\infty) |\psi(-\infty)\rangle, \quad (1.10)$$

où il est explicitement indiqué que $t_0 = -\infty$, l'opérateur U étant défini par la formule

$$U = U(+\infty, -\infty) = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} U(t, t_0). \quad (1.11)$$

Cet opérateur porte le nom de matrice de diffusion⁵.

1.2.3 Changement de représentation

Jusqu'à présent un mode de description a été généralement employé; il s'agissait de la description de Schrödinger. En réalité, elle n'est pas la seule représentation possible. en fait, il n'est pas toujours nécessaire de trouver la solution de l'équation de Schrödinger qui contient souvent trop d'information par rapport aux questions que l'on se pose et alors, l'intégration explicite de l'équation (1.1), ou (1.7), nécessite un effort inutile et excessif. Il est commode d'étudier ces phénomènes dépendants du temps dans des autres descriptions tels que la représentation de Heisenberg et la représentation interaction. Dans la description de Heisenberg la dépendance par rapport au temps est transférée des vecteurs d'états aux observables. Bien entendu l'évolution du système ne peut plus être décrite à partir de la fonction d'onde, ce qui nous conduit à une équation d'évolution des opérateurs (A_H opérateur quelconque écrit en description de Heisenberg)

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{d}{dt} A_S(t) \right)_H. \quad (1.12)$$

⁵Dans plusieurs références, cet opérateur porte le non de la matrice S

La représentation d'interaction semble être une description intermédiaire entre la description de Schrödinger et celle de Heisenberg. Ces représentations sont strictement équivalentes, mais leur utilité réside dans le fait que certaines propriétés quantiques sont plus immédiatement apparentes dans l'une que dans l'autre.

1.3 Le recours vers les méthodes approximatives

Hormis quelques cas extrêmement rares, il n'est en général pas possible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Le plus souvent on est obligé d'avoir recours à des techniques permettant une approche plus ou moins complète et fidèle de la réalité du système étudié. 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. On peut distinguer en gros trois techniques différentes qui s'adressent à des cas de figures assez bien définis

1.3.1 La théorie des perturbations dépendant du temps

Il n'existe que peu de problèmes physique pour lesquels on puisse trouver pour le modèle envisagé, une solution mathématique simple. Dans la plupart des cas une solution approchée doit être cherchée. La théorie des perturbations constitue une de ces approximations. L'idée générale de la méthode est de dégager les effets principaux qui rendent compte globalement du comportement du système, et ensuite de détailler certaines quantités qui découlent d'effets secondaires moins importants.

L'équation de Schrödinger pour l'opérateur d'évolution (1.7) peut s'écrire, sous la forme intégrale suivante [37] :

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t H(t')U(t', t_0)dt'. \quad (1.13)$$

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

$$H(t) = H_0(t) + W(t), \quad (1.14)$$

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

On montre que la solution de l'équation (1.13) est donnée par la série suivante :

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0), \quad (1.15)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t, t_0) = H_0(t) U^{(0)}(t, t_0), \quad (1.16)$$

avec la condition initiale : $U^{(0)}(t_0, t_0) = 1$ et les $U^{(n)}(t, t_0)$, $\forall n \geq 1$ sont données par :

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \int_{\substack{t' t'_n \rangle t'_{n-1} \rangle \dots \rangle t'_2 \rangle t'_1 \rangle t_0}} dt'_n dt'_{n-1} \dots dt'_1 U^{(0)}(t, t'_n) W(t'_n) U^{(0)}(t'_n, t'_{n-1}) \\ W(t'_{n-1}) U^{(0)}(t'_2, t'_1) W(t'_1) U^{(0)}(t'_1, t_0). \quad (1.17)$$

La théorie des perturbations s'applique en générale aux cas où $H_0(t)$ est indépendant du temps et la où la partie dépendant du temps $W(t)$ est petite par rapport à H_0 et peut être considérée comme une perturbation [42], c'est-à-dire on peut toujours l'écrire sous la forme $W(t) = \lambda V(t)$ avec $\lambda \ll 1$ et $V(t)$ est de l'ordre de grandeur de H_0 .

A l'inverse de la théorie des perturbations indépendant du temps, on ne peut pas parler ici des corrections des valeurs propres car les énergies dans ce cas ne sont pas conservées. Mais cette méthode permet de calculer approximativement les fonctions d'onde à partir des états stationnaires du système non perturbé. Quelques études dans la littérature de physique mathématique ont porté sur la recherche des invariants de mouvement pour des classes des hamiltoniens dépendants du temps par la théorie des perturbations [43-45], mais ce domaine de recherche reste un sujet récent qui demande encore beaucoup de

développement.

1.3.2 Approximation soudaine

Dans le cas extrême⁶ où l'hamiltonien du système varie subitement avec le temps on parle d'approximation soudaine, c'est-à-dire on appelle approximation soudaine⁷, l'approximation appliquée dans le cas limite, elle s'énonce comme suit [2,46,47] : « ... A la limite où, c'est-à-dire dans le cas du passage infiniment rapide, l'état dynamique du système reste inchangé ... ». C'est-à-dire l'opérateur d'évolution vérifie :

$$\lim_{T \rightarrow 0} U(T + t_0, t_0) = 1. \quad (1.18)$$

1.3.3 L'approximation adiabatique

Dans l'autre cas extrême où l'hamiltonien du système varie lentement avec le temps, c'est-à-dire $T \rightarrow \infty$, on parle de l'une des méthodes les plus puissantes en mécanique quantique : *l'approximation adiabatique*. Parmi l'une des résultats de ces applications dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps : la phase de Berry où phase géométrique. À travers cette dernière on peut donner aux lecteurs une interprétation sur le rôle de l'approximation adiabatique dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

1.4 Phase de Berry

La phase de Berry est une phase quantique qui se manifeste dans l'étude de systèmes quantiques en évolution adiabatique qui dépendent d'un certain nombre de paramètres classiques [48]. Cette phase est reliée à de nombreux phénomènes physiques comme l'effet

⁶Dans l'autre cas extrême où l'hamiltonien varie lentement en fonction du temps, on parle d'approximation adiabatique.

⁷Pour plus des détails sur cette approximation, le lecteur pourra consulter la référence [2].

Aharonov-Bohm [49] par exemple. Elle a été mesurée pour la première fois en tant que telle en 1986 par Chiao et Tomita [50] dans l'étude de la rotation du plan de polarisation d'une onde se propageant dans une fibre optique "twistée". Depuis, elle a été mise en évidence de nombreuses fois, notamment dans des expériences de physique nucléaire.

1.4.1 Définition de la Phase de Berry

L'approche utilisée sera légèrement différente de l'originale proposée par M. V. Berry [1] qui introduit l'hypothèse adiabatique dès le départ. Ici elle est introduite à la fin des calculs afin de voir la signification physique du mot adiabatique [78]⁸.

Soit un hamiltonien $H(\vec{R}(t))$ qui dépend de m paramètres classiques $\vec{R} = R_1, R_2, \dots, R_m$. Supposons que ces paramètres dépendent adiabatiquement du temps t . Il s'agit en quelque sorte d'une famille d'hamiltoniens. L'équation de Schrödinger (1.1) s'écrit dans ce cas :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(\vec{R}(t)) |\psi(t)\rangle. \quad (1.19)$$

Les états propres (choisis orthonormés) de $H(\vec{R}(t))$ sont des états propres instantanés au sens où ils ne sont états propres qu'en un temps t donné :

$$H(\vec{R}(t)) |m, \vec{R}(t)\rangle = E_m(\vec{R}(t)) |m, \vec{R}(t)\rangle. \quad (1.20)$$

La solution de l'équation de Schrödinger (1.19) peut être écrite dans la base de ces états propres car ils constituent une base de l'espace de Hilbert à chaque instant :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E_m(\vec{R}(t')))\right) |m, \vec{R}(t)\rangle, \quad (1.21)$$

où $E_m(\vec{R}(t'))$ est la phase dynamique habituelle (celle qui est présente lorsque l'hamiltonien ne dépend pas du temps). Le tout est de trouver les coefficients $a_m(t)$. Pour cela,

⁸Pour plus des détails sur cette méthode, le lecteur pourra consulter ce référence.

on injecte (1.21) dans l'équation (1.19) en utilisant (1.20), on projette l'équation obtenue sur l'état propre $\langle n, \vec{R}(t) |$, on obtient ainsi une équation différentielle pour $a_m(t)$:

$$\begin{aligned} \dot{a}_n(t) &= -a_n(t) \langle n, \vec{R}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | n, \vec{R}(t) \rangle \\ &\quad - \sum_{m \neq n} a_m(t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [E_n(t') - E_m(t')] \right) \\ &\quad \times \frac{\langle n, \vec{R}(t) | \partial H(R(t))/\partial t | m, \vec{R}(t) \rangle}{E_m(t) - E_n(t)}. \end{aligned} \quad (1.22)$$

L'hypothèse adiabatique consiste à poser :

$$A_{mn}(\vec{R}(t)) = \langle n, \vec{R}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | m, \vec{R}(t) \rangle = 0, \quad m \neq n, \quad (1.23)$$

et donc le deuxième terme dans l'équation (1.22) tombe et la solution s'écrit :

$$a_n(t) = \exp i\gamma_n(t), \text{ où } \gamma_n(t) = i \int_0^t dt' A_n(\vec{R}(t')), \quad (1.24)$$

avec :

$$A_{nn}(\vec{R}(t)) = A_n(\vec{R}(t)) = \langle n, \vec{R}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | n, \vec{R}(t) \rangle. \quad (1.25)$$

Physiquement, l'hypothèse adiabatique signifie que le taux (la vitesse) de transition entre états propres est petit par rapport à la fréquence de Bohr $f_{mn} = (E_m - E_n)/2\pi\hbar$ pour la transition $n \rightarrow m$. Autrement dit, les transition entre états propres différents sont donc infiniment lentes et n'ont en fait pas lieu⁹. Si le système se trouve initialement dans le $n^{\text{ème}}$ état propre, il y restera toujours. On a implicitement supposé que le spectre était non dégénéré en tout temps.

Géométriquement, ce la signifie que l'état propre $| n, \vec{R}(t) \rangle$ subit un transport parallèle

⁹C'est-à-dire que l'évolution temporelle du système est diagonale dans la base qu'on a choisi. En d'autre terme on néglige des couplages non-adiabatiques entre les états propres de l'hamiltonien.

dans l'espace des paramètres : lorsque les paramètres $\vec{R}(t)$ varient au cours du temps, l'état du système change mais n'acquiert jamais de composante suivant les états de valeur propre $E_{m \neq n}(\vec{R}(t))$. Cependant, cette phase géométrique peut être éliminée simplement en choisissant un autre $n^{\text{ème}}$ état propre de base $|\widetilde{n, \vec{R}(t)}\rangle$ tout aussi valable, tel que

$$|\widetilde{n, \vec{R}(t)}\rangle \equiv e^{i\gamma_n(t)} |n, \vec{R}(t)\rangle, \quad (1.26)$$

et dans ce cas la phase $\tilde{\gamma}_n(t)$ qui irait devant la phase dynamique dans la solution serait nulle. La phase géométrique ne semble donc pas avoir de signification physique. C'était à peu près ce que tout le monde pensait depuis les travaux de V. Fock en 1928, jusqu'à ce que M. V. Berry remarque en 1983 que si l'évolution des paramètres se fait sur un cycle alors la phase ne peut plus être éliminée de la sorte. En effet, considérons un parcours C fermé dans l'espace des paramètres tel que $\vec{R}(T) = \vec{R}(0)$. La phase géométrique (1.24) est maintenant appelée phase de Berry :

$$\begin{aligned} \gamma_n(T) &= i \int_0^T \langle n, \vec{R}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | n, \vec{R}(t) \rangle dt, \\ \gamma_n(C) &= i \int_{R(0)}^{R(T)} \langle n, \vec{R} | \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n, \vec{R} \rangle d\vec{R} \end{aligned} \quad (1.27)$$

et malgré le fait que $\vec{R}(T) = \vec{R}(0)$, la phase de Berry n'est pas obligatoirement nulle, sa valeur dépend du chemin C parcouru. Ceci marque le caractère non intégrable de la phase de Berry et va conduire à son interprétation en termes d'holonomie. Elle ne dépend pas du temps mis pour parcourir chaque segment de chemin. C'est en ce sens que la phase de Berry $\gamma_n(C)$ est d'origine purement géométrique par opposition à la phase dynamique $\delta_n(T)$:

$$\begin{aligned} |\psi(C)\rangle &= \exp i[\gamma_n(C) + \delta_n(T)] |n, \vec{R}(t)\rangle \\ &= \exp i[\gamma_n(C) + \delta_n(T)] |n, \vec{R}(0)\rangle, \end{aligned} \quad (1.28)$$

où on a utilisé le fait que l'état propre $|n, \vec{R}\rangle$ est une fonction univaluée de \vec{R} . Les phases réelles sont données par :

$$\begin{aligned}\gamma_n(C) &= i \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(T)} \langle n, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\mu} | n, \vec{R} \rangle R^\mu, \quad \mu = 1, 2, \dots, m \\ &= i \oint_c \vec{A}_n(\vec{R}) d\vec{R},\end{aligned}\tag{1.29}$$

$$\delta_n(T) = - \int_0^T \langle n, \vec{R}(t) | H(\vec{R}(t)) | n, \vec{R}(t) \rangle dt.\tag{1.30}$$

On peut comprendre intuitivement les origines respectives de ces deux phases. Selon le théorème adiabatique [2], si un système a une évolution adiabatique cyclique, alors il retournera à son état physique initiale. L'amplitude de probabilité pour passer de $\psi_{initial}$ en $t = 0$ à ψ_{final} en $t = T$ donnée par :

$$\langle \psi_{final} | \psi_{initial} \rangle = \exp i[\gamma_n(T) + \delta_n(T)].\tag{1.31}$$

1.4.2 Interprétation physique de la phase de Berry

La phase de Berry peut être interprétée comme un flux magnétique dans l'espace des paramètres. Pour le voir, il faut exprimer la phase de Berry comme une intégrale sur une surface S de la courbure qui se fait au moyen du théorème de Stokes. Pour bien voir ce qui se passe, supposons un moment que l'espace des paramètres est à trois dimensions. Ici on explicite le fait qu'il s'agit du $n^{\text{ème}}$ état propre car d'autres états propres interviennent dans les expressions. La phase de Berry s'écrit (1.29) en utilisant le théorème de Stokes et le fait que la phase de Berry soit réelle (et donc que la connexion

est purement Imaginaire) :

$$\begin{aligned}
\gamma_n(C) &= i \int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(T)} \langle n, \vec{R} | \frac{\partial}{\partial R^\mu} | n, \vec{R} \rangle dR^\mu \\
&= i \oint_c \vec{A}_n(\vec{R}) d\vec{R} \\
&= -\text{Im} \iint_s d\vec{S} \cdot \vec{\nabla} \times \vec{A}_n,
\end{aligned} \tag{1.32}$$

où \times est le produit vectoriel habituel. En réinjectant la définition de \vec{A}_n et en insérant la relation de complétude on trouve :

$$\begin{aligned}
\gamma_n(C) &= -\text{Im} \iint_s d\vec{S} \cdot \langle \vec{\nabla}_n, \vec{R} | \times | \vec{\nabla}_n, \vec{R} \rangle \\
&= -\text{Im} \iint_s d\vec{S} \cdot \sum_{m \neq n} \langle \vec{\nabla}_n, \vec{R} | \times | m, \vec{R} \rangle \times \langle m, \vec{R} | \vec{\nabla} | n, \vec{R} \rangle.
\end{aligned} \tag{1.33}$$

La réduction de la somme à $m \neq n$ est due au fait que la connection est purement imaginaire, donc portée "au carré" elle devient réelle et donc sa partie imaginaire est nulle. Les éléments non-diagonaux sont obtenus en utilisant l'équation de Schrödinger deux fois :

$$\langle m, \vec{R} | \vec{\nabla}_{\vec{R}} | n, \vec{R} \rangle = \frac{\langle m, \vec{R}(t) | \vec{\nabla}_{\vec{R}} H(\vec{R}) | n, \vec{R}(t) \rangle}{E_n(t) - E_m(t)}, \quad m \neq n. \tag{1.34}$$

Finalement, on obtient une expression analogue à celle du flux magnétique en électromagnétisme où le champ \vec{V}_n est l'analogie du champ magnétique et donc de la courbure dans l'espace des paramètres :

$$\gamma_n(C) = \iint d\vec{S} \cdot \vec{V}_n \tag{1.35}$$

$$\vec{V}_n = -\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n, \vec{R} | \vec{\nabla}_{\vec{R}} H(\vec{R}) | m, \vec{R} \rangle \times \langle m, \vec{R} | \vec{\nabla}_{\vec{R}} H(\vec{R}) | n, \vec{R} \rangle}{(E_m(\vec{R}) - E_n(\vec{R}))^2}, \tag{1.36}$$

où l'antisymétrie de la courbure se retrouve dans l'antisymétrie vectoriel. Cette expression

de la phase de Berry montre deux choses importantes. La première est que la phase de Berry est indépendante de $\vec{\nabla}_{\vec{R}} |n, \vec{R}\rangle$ et donc de toute phase relative entre des états situés en des \vec{R} différents. Ceci peut paraître étonnant car le vecteur \vec{V}_n s'écrit comme le rotationnel (1.32) d'un vecteur \vec{A}_n qui dépend des phases relatives d'après sa définition (1.25) :

$$|n, \vec{R}\rangle \longrightarrow e^{i\chi(\vec{R})} |n, \vec{R}\rangle, \quad (1.37)$$

$$\vec{A}_n \longrightarrow \vec{A}_n + i\vec{\nabla}\chi. \quad (1.38)$$

Cependant le rotationnel est invariant. La phase de Berry est donc invariante sous les transformation (1.38) de jauge $U(1)$. De plus, sa valeur est unique car la divergence $\vec{\nabla} \cdot \vec{V}_n$ est nulle sauf s'il existe des singularités de type monopôle dans le potentiel vecteur. C'est la deuxième chose importante que l'on peut déduire de (1.32) : il apparaît des monopôles dans l'espace des paramètres là où il existe une dégénérescence du spectre d'énergie.

1.4.3 Généralisations non adiabatiques

Evolution cyclique

De nature géométrique, la phase de Berry apparaît également pour des évolutions autres qu'adiabatiques. Aharonov et Anandan [51], ont généralisé l'évolution adiabatique cyclique de Berry, en considérant une évolution cyclique quelconque au cours de laquelle un état reprend au bout du temps T sa valeur initiale à une phase constante près :

$$|\psi(t+T)\rangle = e^{i\alpha} |\psi(t)\rangle. \quad (1.39)$$

Si on choisit pour représenter les rayons une famille continue (donc cyclique) d'états de référence $|\tilde{\psi}(t)\rangle$, ($|\tilde{\psi}(t+T)\rangle = |\tilde{\psi}(t)\rangle$), on définit la phase $\alpha(t)$ de l'état $|\psi(t)\rangle$ au cours de son évolution par :

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} |\tilde{\psi}(t)\rangle. \quad (1.40)$$

Comme par hypothèse $|\psi(t)\rangle$ satisfait de manière exacte l'équation de Schrödinger, cette phase est déterminée-t-elle aussi de manière exacte. Sa dérivée :

$$\dot{\alpha}(t) = -\frac{1}{\hbar} \langle \tilde{\psi}(t) | H(t) | \tilde{\psi}(t) \rangle + \langle \tilde{\psi}(t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \tilde{\psi}(t) \rangle \quad (1.41)$$

contient deux termes, que Aharonov et Anandan interprètent comme des contributions dynamique et géométrique.

Théorie des invariants

Une approche généralisant celle d'Aharonov et Anandan est la théorie des invariants ou théorie de Lewis et Riesenfeld [3]. Soit $I(t)$ un opérateur dépendant du temps vérifiant l'équation :

$$\frac{\partial I}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [I(t), H(t)]. \quad (1.42)$$

Et soit $|n, t\rangle$ un choix, continu en t , de vecteurs propres de référence de $I(t)$. $I(t)$ s'exprime en fonction de l'opérateur d'évolution $U(t)$ de l'équation de Schrödinger ($i\hbar\partial_t U = HU$) par :

$$I(t) = U(t)I(0)U^\dagger(t), \quad (1.43)$$

il en résulte que l'évolué $U(t)|n, 0\rangle$ d'un état initial $|n, 0\rangle$ est toujours état propre de $I(t)$. Repérant alors sa phase $\alpha(t)$ par rapport aux états $|n, t\rangle$ par :

$$U(t)|n, 0\rangle = e^{i\alpha(t)}|n, t\rangle. \quad (1.44)$$

On établit facilement pour elle l'équation :

$$\dot{\alpha}(t) = -\frac{1}{\hbar} \langle n, t | H(t) | n, t \rangle + \langle n, t | i \frac{\partial}{\partial t} | n, t \rangle, \quad (1.45)$$

dont le second membre contient lui aussi une partie dynamique et une partie géométrique. L'analyse de Berry correspond au cas $I(0) = H(0)$ (est une évolution adiabatique) et celle d'A-A au cas $I(0) = |\Psi(0)\rangle \langle \Psi(0)|$ (est une évolution cyclique).

Les hamiltoniens périodiques

Les évolutions régies par des hamiltoniens périodiques ont été également étudiées [52-54] car elles relèvent aussi, de l'approche d'Aharonov-Anandan. En effet la décomposition de Floquet de l'opérateur d'évolution :

$$U(t) = V(t) \exp iMt \quad ; \quad (V(t+T) = V(t)) \quad (1.46)$$

montre que tout état $|n, 0\rangle$ qui, à l'instant $t = 0$ est un état propre de l'opérateur M , est un état cyclique ($V(T) = V(0) = 1$). Mais on peut aussi utiliser l'approche des invariants : Les états $|n, t\rangle = V(t) |n, 0\rangle$, qui peuvent être choisis comme des états de référence $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ dans l'approche d'Aharonov-Anandan, sont les états propres de l'opérateur :

$I(t) = V(t)MV^+(t)$ qui est invariant, puisqu'il s'écrit aussi $I(t) = U(t)MU^+(t)$.

Systèmes non hermitiens

La généralisation des résultats de Berry aux systèmes régis par des hamiltoniens non hermitiens a été discutée au niveau théorique de différentes manières et calculée pour de nombreux exemples [26,55-57]. La seule différence est que cette dernière est complexe tandis que la phase de Berry est réelle.

La phase de Berry pour le spectre continu

La phase géométrique a été généralisée pour le spectre continu par M. Maamache et Y. Saâdi [58]. L'analogie de la phase de Berry est établie sous la forme :

$$\gamma^G(k, t) = \int_0^t \langle \delta\varphi(k, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k, t') \rangle dt', \quad (1.47)$$

tel que k est une variable $\in I$. Cette phase a été interprétée comme étant la matrice S de diffusion.

Chapitre 2

La théorie des invariants et les systèmes dépendants du temps

2.1 Introduction

La théorie des invariants représente l'un des méthodes puissantes pour résoudre les systèmes dépendants du temps. Dans cette partie de notre travail, nous donnerons quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants qui permettront aux lecteurs d'avoir une idée sur le rôle de la théorie des invariants quand à la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

2.2 Intégrales de mouvement

En mécanique quantique on retrouve les mêmes intégrales de mouvement qu'en mécanique classique. Une grandeur L sera dite intégrale de mouvement si elle obéit à

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [L, H] \equiv 0, \quad (2.1)$$

Le cas où la grandeur L ne dépend pas explicitement du temps est particulièrement intéressant, puisqu' alors on a

$$\frac{dL}{dt} = [L, H] \equiv 0, \quad (2.2)$$

ce qui veut dire que pour les intégrales de mouvement (ne dépendant pas du temps de façon explicite) le crochet quantique de Poisson est égale à 0. Il découle des formules (2.1) et (2.2) que la valeur moyenne des intégrales de mouvement est indépendante du temps $\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | L | \psi(t) \rangle = 0$. Quel que soit l'état $|\Psi(t)\rangle$ du système physique, la valeur moyenne de L dans cet état n'évolue pas au cours du temps (d'où l'appellation "*constante du mouvement*") [59].

On peut montrer aussi que la probabilité $w(l_n, t)$ de trouver à un instant t une certaine valeur de l'intégrale de mouvement, l_n par exemple, est, elle aussi indépendante du temps. Puisque les opérateurs L et H commutent, ils ont des fonctions propres communes $|\varphi_n(x)\rangle$:

$$L |\varphi_n(x)\rangle = l_n |\varphi_n(x)\rangle, \quad (2.3)$$

$$H |\varphi_n(x)\rangle = E_n |\varphi_n(x)\rangle. \quad (2.4)$$

Développons un état arbitrairement choisi $|\psi(x, t)\rangle$ sur la base des fonctions propres $|\varphi_n(x)\rangle$:

$$|\psi(x, t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\varphi_n(x)\rangle, \quad (2.5)$$

avec $a_n(t) = a_n(t_0) \exp(-iE_n t/\hbar)$. Puisque le développement (2.5) est le développement de $|\psi(x, t)\rangle$ suivant les fonctions propres de l'opérateur L , on a

$$w(l_n, t) = |a_n(t)|^2 = \text{const.} \quad (2.6)$$

La forme des intégrales de mouvement dépend généralement de l'espace de champ de force dans lequel se meut la particule. Pour un mouvement libre, l'intégrale de mouvement est l'impulsion. Dans le champ d'une force centrale s'applique la loi des surfaces, selon

laquelle le moment cinétique est intégrale de mouvement. Dans le cas où l'hamiltonien n'est pas une fonction dépendante explicitement du temps on aura¹

$$\frac{dH}{dt} = 0. \quad (2.7)$$

Or comme dans ce cas le hamiltonien se confond avec l'opérateur de l'énergie totale, (2.7) signifie que dans un champ de forces invariables dans le temps, l'énergie totale est intégrale de mouvement cela revient à dire que (2.7) exprime en mécanique quantique la loi de conservation de l'énergie.

2.3 Théorème de Liouville et l'invariant mécanique

En physique, le théorème de Liouville est utilisé en mécanique classique [34], en mécanique quantique [46] et en physique statistique [60-62]. Ce théorème stipule que le volume de l'espace des phases est constant le long des trajectoires du système, autrement dit ce volume reste constant dans le temps.

Pour apprécier ceci, on considère la méthode qui exprime les équations de Hamilton pour un système à N particules identiques :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{et} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} ; i = 1 \text{ à } N, \quad (2.8)$$

sous une autre forme en introduisant la fonction de distribution $\rho(q_1, p_1, \dots, q_N, p_N, t)$ (nous écrirons $\rho(p, q, t)$ ou même ρ tout court). L'espace de phase associé à ce problème de N particules a $6N$ dimensions. La quantité $\rho(p, q, t)dpdq$ représente la probabilité de trouver N particules dans la volume élémentaire $dpdq$. Par conséquent, si l'on intègre sur

¹Cet équation signifie que la valeur moyenne de l'énergie \bar{E} , et les probabilités de trouver les différentes valeurs possibles de l'énergie $E = E_n$ ne dépendent pas du temps.

tout l'espace de phase on obtient

$$\int \rho(p, q, t) dpdq = 1. \quad (2.9)$$

Si nous considérons un élément de volume $d\Gamma = dpdq$ centré en p, q au temps t , celui-ci deviendra $d\Gamma' = dp'dq'$ au temps $t + dt$. Les quantités p', q' déduites de p, q en utilisant des transformations canoniques [34] de sorte que l'élément de volume $d\Gamma'$ est relié à $d\Gamma$ par la relation

$$d\Gamma' = |J| d\Gamma, \quad (2.10)$$

dans laquelle J est le jacobien de la transformation. Il est important de noter qu'au second ordre près $J = 1$, ce qui implique le résultat :

$$d\Gamma' = d\Gamma \quad (2.11)$$

et qui signifie que l'élément de volume est *invariant* au cours du temps. Ce résultat est connu sous le nom de *théorème de Liouville*

Si nous différencions l'équation (2.9) par rapport au temps en tenant compte de ce résultat, nous avons :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int \rho(p, q, t) dpdq \\ &= \int \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{dq_i}{dt} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right] dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N \\ &= \int \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{dH}{dp_i} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{dH}{dq_i} \right] dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N \\ &= 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Ceci devant être valable quel que soit l'élément de volume, on en déduit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{dH}{dp_i} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{dH}{dq_i} = 0. \quad (2.13)$$

On appelle crochet de Poisson de deux quantités A et B l'expression :

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{dB}{dp_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{dB}{dq_i}. \quad (2.14)$$

Avec cette notation, on peut écrire (2.13) sous la forme :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}. \quad (2.15)$$

Cette équation s'appelle *L'équation de Liouville*. Elle décrit l'évolution de la fonction de distribution dans l'espace de phase. Elle est équivalente aux équations de Hamilton.

Il résulte directement du théorème de Liouville que la fonction de distribution ne peut s'exprimer que par des combinaisons des variables p et q , qui restent constantes lors du déplacement du sous-système considéré comme fermé [46,62]. Ces combinaisons des variables sont appelées *invariants mécaniques* ou *intégrales du mouvement* ; on sait que ce sont les intégrales premières des équations du mouvement. Par conséquent, on peut dire que la fonction de distribution $\rho(p, q, t)$ qui est une fonction des invariants mécaniques est elle-même une intégrale de mouvement.

Dans le cas d'un système conservatif, l'énergie est la constante du mouvement la plus utilisée pour bâtir des ensembles à fonction de distribution indépendante du temps. Dans certains cas, lorsque l'on a affaire à des mouvements de rotation, on peut aussi considérer le moment cinétique total du sous-système comme constante du mouvement. Dans la plus part des cas on peut prendre la fonction de distribution sous la forme [62]

$$\ln \rho = \alpha_N + \beta E_N(p, q), \quad (2.16)$$

dont les coefficients α_N et β sont constants et $E_N(p, q)$ représente l'énergie du système. Dans ce cas le logarithme² de la fonction de distribution est une constante de mouvement.

2.4 L'analogie quantique de l'équation de Liouville

L'analogie quantique de l'équation de Liouville est représenté par l'évolution temporelle d'un opérateur quantique qui est appelée *la matrice densité*. À l'aide le principe de correspondance³ qui reliant les objets de la mécanique classique à ceux de la mécanique quantique, on obtient l'équation d'évolution

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho, H] \equiv \frac{d\rho}{dt} = 0 \quad (2.17)$$

qui connue sous le nom d'équation de *Liouville-Van Neumann*. Dans ce cas ρ représente l'opérateur densité⁴ (matrice densité) qui est défini par.

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.18)$$

Il est important de noter aussi que l'équation de Liouville traduit en fait l'analogie classique de la conservation du nombre d'états en mécanique quantique en fonction de t et elle représente la limite classique de l'équation de *Liouville-Von Neumann*. Comme nous avons obtenu l'interprétation de la fonction de distribution comme un invariant mécanique en mécanique classique, on peut effectivement arriver au résultat analogue qui présente la matrice densité comme un invariant mécanique en mécanique quantique et on peut démontrer que le logarithme de la matrice densité ($\ln \rho$) est un invariant mécanique [62]. On peut citer comme exemple concret de ce résultat, l'entropie de Von

²Dans le cas où le logarithme de la fonction de distribution est présenté sous forme d'une quantité additive, la fonction de distribution doit être non seulement une intégrale de mouvement, mais une intégrale de mouvement additive .

³La quantité $[A, B]$ représente le commutateur quantique et la quantité $\{A, B\}$ représente le crochet de Poisson classique .

⁴Pour un mélange statistique la matrice densité s'écrit sous la forme : $\hat{\rho}_m = \sum_i^P p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i^P p_i \rho_i$

Neumann qui est défini par : $S = -k_B Tr(\rho \ln \rho)$.

2.5 Relation invariant de Lewis-Riesenfeld et solution de l'équation de Schrödinger

L'invariant de Lewis et Riesenfeld [3] forme une extension d'un type de traitement des invariants dans la physique pré-quantique qui portent le nom Liouville-Von Neumann, à savoir la physique statistique et la mécanique classique, et qui repose sur les mêmes idées. L'utilité des invariants dépendants explicitement du temps en théorie quantique a été faite pour la première fois sur l'oscillateur harmonique quantique de fréquence dépendante du temps et sur une particule chargée dans un champ électromagnétique [3]. Cette étude a révélé une relation simple entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Dans le but d'illustrer cette théorie d'une manière simple on considère un système physique décrit par un Hamiltonien $H(t)$ dépendant explicitement du temps et on suppose l'existence d'un autre opérateur hermitien⁵ qui dépend explicitement du temps $I(t)$.

L'opérateur $I(t)$ est invariant lorsque il satisfait la condition

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0, \quad (2.19)$$

tel que $I^\dagger(t) = I(t)$. L'évolution au cours du temps de ce système est représenté par l'équation de Schrödinger (1.1).

La multiplication de l'équation (2.19) par le bra $\langle \psi(t) |$ à gauche et l'utilisation de l'équation de Schrödinger (1.1), nous permettra de déduire une relation importante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I |\psi(t)\rangle) = H(I |\psi(t)\rangle) \quad (2.20)$$

⁵Cette théorie a été généralisée pour les systèmes non hermitiens par J. C. Garrison et *al* en 1988.

qui signifie que l'action de l'opérateur invariant sur le vecteur d'état de Schrödinger est aussi solution de l'équation de Schrödinger. Ce résultat est valable quelque soit la forme de l'invariant.

On va montrer que le vecteur d'état de l'invariant représente une solution de l'équation de Schrödinger, à cet effet on considère un opérateur invariant $I(t)$ hermitien ayant des valeurs propres λ avec des états propres $|\lambda, n\rangle$ qui forment une base de l'espace de Hilbert, le nombre n représente tout les nombres quantiques (autres que λ) qui sont nécessaires à spécifier les états propres de l'invariant

$$I(t) |\lambda, n\rangle = \lambda |\lambda, n\rangle, \quad (2.21)$$

$$\langle \lambda', n' | \lambda, n \rangle = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{n'n}. \quad (2.22)$$

Les valeurs propres λ sont réels⁶ et indépendantes du temps.

La différentiation de l'équation (2.21) conduit à

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, n\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle. \quad (2.23)$$

En multipliant l'équation (2.19) par le ket $|\lambda, n\rangle$ on obtient

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle + IH |\lambda, n\rangle - HI |\lambda, n\rangle = 0. \quad (2.24)$$

Le produit scalaire de l'équation (2.24) par le vecteur d'état $\langle \lambda', n' |$

$$i\hbar \langle \lambda', n' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle + (\lambda' - \lambda) - \langle \lambda', n' | H |\lambda, n\rangle = 0 \quad (2.25)$$

implique que

$$\langle \lambda', n' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle = 0, \quad (2.26)$$

⁶réel signifié que le système est hermitien, dans le système non hermitien la valeur propre est complexe.

le produit scalaire de l'équation (2.23) avec le ket $|\lambda, n\rangle$ conduit à une expression qui exprime que la valeur propre de l'invariant est indépendante du temps :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \lambda, n | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, n \rangle = 0. \quad (2.27)$$

Il est clair que les états propres de l'invariant peuvent dépendre du temps.

Dans le but de chercher la relation qui existe entre les états propres de l'invariant I et les solutions de l'équation de Schrödinger, on écrit tout d'abord l'équation d'évolution de l'état $|\lambda, n\rangle$, en utilisant les deux équations (2.23) et (2.27) :

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle = \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle, \quad (2.28)$$

et on élimine le terme $\langle \lambda', n' | \frac{\partial I}{\partial t} | \lambda, n \rangle$ en utilisant le produit scalaire de $|\lambda', n'\rangle$ par l'équation (2.25), on obtient finalement

$$i\hbar(\lambda - \lambda') \langle \lambda', n' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, n \rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', n' | H | \lambda, n \rangle. \quad (2.29)$$

Le cas $\lambda' \neq \lambda$ donne

$$i\hbar \langle \lambda', n' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, n \rangle = \langle \lambda', n' | H | \lambda, n \rangle. \quad (2.30)$$

Remarquons l'équation (2.29) n'implique pas que

$$i\hbar \langle \lambda, n' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, n \rangle = \langle \lambda, n' | H | \lambda, n \rangle. \quad (2.31)$$

Si dans l'équation (2.30) on prend $\lambda' = \lambda$ (bien que $\lambda' \neq \lambda$), dans ce cas on déduit immédiatement que l'état $|\lambda, n\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire l'état propre de l'invariant représente une solution particulière du vecteur d'état de Schrödinger $|\psi(t)\rangle$.

La phase associée aux états propres $|\lambda, n\rangle$ n'est pas fixée par des conditions initiales, on peut la choisir en multipliant les états $|\lambda, n\rangle$ par des facteurs de phase arbitraires

dépendants du temps. En effet on définit un nouveau vecteur d'état de $I(t)$ relié par le vecteur d'état initial par une transformation du gauge dépendante du temps

$$|\lambda, n\rangle_\alpha = \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n\rangle, \quad (2.32)$$

tel que le facteur $i\alpha_{\lambda n}(t)$ est une fonction dépendante du temps. Puisque $I(t)$ ne contient pas, par supposition, des opérateurs dérivatifs par rapport au temps, dans ce cas les vecteurs $|\lambda, n\rangle$ sont des états propres orthonormalisés de l'invariant $I(t)$

$$I |\lambda, n\rangle_\alpha = I \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n\rangle = \lambda \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n\rangle, \quad (2.33)$$

tel que ${}_\alpha \langle \lambda', n' | \lambda, n \rangle_\alpha = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{n'n}$.

Pour $\lambda' \neq \lambda$, l'équation (2.30) reste vraie pour les éléments de matrice construits par les nouveaux vecteurs propres. Chacun de ces vecteurs propres satisfait l'équation de Schrödinger si on choisit les phases $\alpha_{\lambda n}(t)$ de telle sorte que l'équation (2.23) soit vérifiée pour $\lambda' = \lambda$. Ce qui équivalent à l'équation différentielle du premier ordre pour $\alpha_{\lambda n}(t)$, provenant de l'injection de (2.32) dans (2.19)

$$\hbar \delta_{\lambda'\lambda} \dot{\alpha}_{\lambda n}(t) = \langle \lambda, n' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, n \rangle. \quad (2.34)$$

Pour satisfaire cette dernière équation, les états $|\lambda, n\rangle$ doivent être choisis de telle sorte que le membre droit de l'équation (2.34) s'annule pour le cas $\lambda' \neq \lambda$. Cette diagonalisation est toujours possible car l'opérateur $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H)$ est hermitien. Et dans ce cas l'expression de la phase $\alpha_{\lambda n}(t)$ s'écrit sous la forme

$$\hbar \dot{\alpha}_{\lambda n}(t) = \langle \lambda, n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, n \rangle. \quad (2.35)$$

Ce dernier résultat représente une contribution de deux termes, l'un représente la phase usuelle dynamique et l'autre représente la phase géométrique.

La solution générale de l'équation de Schrödinger est donnée par l'expression :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\lambda n} C_{\lambda n} \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n, t\rangle, \quad (2.36)$$

tel que les $C_{\lambda n}$ sont des coefficients indépendants du temps.

Chapitre 3

Solution exacte de l'équation de Schrödinger pour le potentiel coulombien dépendant du temps

3.1 Introduction

L'intérêt physique considérable qui est attaché au problème du potentiel central¹ découle d'une propriété importante concernant l'interaction mutuelle entre deux particules. Lorsque cet interaction est décrite par une énergie potentielle ne dépendant que de leur position relative, on peut se ramener à un problème plus simple, où intervient une seule particule fictive ; de plus, lorsque le potentiel d'interaction entre les deux particules dépend seulement de leur distance, la particule fictive évolue sous l'influence d'un potentiel central. Parmi les potentiels centraux le potentiel coulombien joue un rôle primordial aux niveaux atomiques à cause de ses propriétés concernant le spectre d'énergie (descret, continue) et sa singularité à l'origine.

L'atome d'hydrogène, constitué d'un électron et d'un proton exerçant l'un sur l'autre

¹Nous avons cité dans cette partie le terme central, parce que le potentiel coulombien $V(x, t) = -Z(t)/x$ est un cas particulier du potentiel central.

une attraction électrostatique, fournit l'exemple le plus simple d'un système de ce type. Ce n'est d'ailleurs pas le seul : en plus des isotopes de l'hydrogène (deutérium, tritium), on peut citer les ions hydrogénoïdes, c'est-à-dire les systèmes composés d'un seul électron et d'un noyau, tels que les ions He^+ , Li^{++} , etc... Signalons que les résultats exacts relatifs à l'atome d'hydrogène servent de point de départ pour tous les calculs approchés concernant les atomes plus complexes.

Dans cette partie du travail, nous nous intéressons à la solution de l'équation de Schrödinger (1.1) pour une particule plongée dans un potentiel coulombien dépendant du temps $V(x, t) = -Z(t)/x$.

Il est intéressant de souligner que le problème d'une particule qui se meut dans un champ central peut être ramener à un problème à une dimension, pour cette raison nous proposons donc un hamiltonien sous la forme [30] :

$$H(x, p, t) = A(t)p^2 + C(t) \left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x} \right) + \frac{E(t)}{x^2} - \frac{Z(t)}{x}, \quad (3.1)$$

tel que $H(x, p, t)$ est définie dans la région $x \geq 0$, avec $A(t), C(t), E(t)$, et $Z(t)$ sont des fonctions positives dépendantes du temps. Pour plus de précision les deux fonctions $E(t)$ et $Z(t)$ représentent les forces des potentiels singuliers. La variation en fonction du temps de ces forces sont investis dans la littérature par Fairbairn [63].

3.2 Construction de l'invariant

On cherche la forme de l'invariant $I(x, p, t)$ sous la forme

$$I(x, p, t) = \alpha(t)x^2 + \gamma(t)p^2 + \beta(t)(xp + px) + \delta(t) \left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x} \right) + \frac{\lambda(t)}{x^2} - \frac{\eta(t)}{x} + \xi(t), \quad (3.2)$$

où $\alpha(t) - \xi(t)$ sont des fonctions positives arbitraires dépendantes du temps à déterminer.

Substituons le deux équations (3.1) et (3.2) dans l'équation de Liouville-Von Neumann

(2.19), nous obtenons les équations suivantes :

$$\dot{\alpha} = 0, \quad (3.3)$$

$$\dot{\beta} = -2\alpha A, \quad (3.4)$$

$$\dot{\gamma} = -4\beta A, \quad (3.5)$$

$$\dot{\eta} = -2\beta Z, \quad (3.6)$$

$$\dot{\delta} = -4\beta C, \quad (3.7)$$

$$\dot{\lambda} = -4\beta E, \quad (3.8)$$

$$\dot{\xi} = -4\alpha C, \quad (3.9)$$

$$\gamma Z = \eta A, \quad (3.10)$$

$$\delta Z = \eta C, \quad (3.11)$$

$$\gamma C = \delta A, \quad (3.12)$$

$$\lambda A = \gamma E, \quad (3.13)$$

$$\lambda C = \delta E. \quad (3.14)$$

Les rapports $\frac{C(t)}{A(t)}$ et $\frac{E(t)}{A(t)}$ sont constants d'après les équations (3.3)-(3-14). Pour plus de commodité dans la suite de ce travail, on pose $k_1 = \frac{C(t)}{A(t)}$ et $k_2 = \frac{E(t)}{A(t)}$. Lorsque on définit le moment cinétique généralisé sous la forme $P = \frac{1}{2A}(\frac{d}{dt}x)$, dans ce cas il est possible d'éliminer le moment canonique p de l'équation (3.1) en utilisant l'expression $P = \frac{1}{2A}(\frac{d}{dt}x) = p + k_1/x$, laquelle est similaire au moment canonique correspondant à l'équation radiale de l'atome d'hydrogène à deux dimensions. Grâce à ce processus, l'hamiltonien dans l'équation (3.1) devient exactement une somme de deux parties l'une représente l'énergie cinétique et l'autre représente l'énergie potentielle électrostatique de Coulomb : $H(x, p, t) = \frac{1}{4A}(\frac{d}{dt}x)^2 - \frac{Z(t)}{x}$ (notons que nous avons pris $k_2 = k_1^2$).

Alors, la résolution du système d'équation (3.3)-(3-14) nous donne explicitement des

coefficients de l'invariant sous la forme intégrable suivante :

$$\alpha(t) = \alpha_0, \quad (3.15)$$

$$\beta(t) = \beta_0 - 2\alpha_0 \int_0^t A(t') dt', \quad (3.16)$$

$$\gamma(t) = \gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2, \quad (3.17)$$

$$\delta(t) = \frac{\delta_0}{\gamma_0} \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right), \quad (3.18)$$

$$\eta(t) = \frac{\eta_0}{\gamma_0^{\frac{1}{2}}} \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (3.19)$$

$$\lambda(t) = \frac{\lambda_0}{\gamma_0} \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right), \quad (3.20)$$

$$\xi(t) = \frac{2\delta_0}{\gamma_0} \left(\beta_0 - 2\alpha_0 \int_0^t A(t') dt' \right), \quad (3.21)$$

tel que, $\delta_0 = k_1\gamma_0$ et $\lambda_0 = k_2\gamma_0$. Insérons les équations (3.15)-(3.21) dans l'équation (3.2), nous obtenons l'expression de l'opérateur invariant :

$$\begin{aligned} I(x, p, t) = & \alpha_0 x^2 + \left(\beta_0 - 2\alpha_0 \int_0^t A(t') dt' \right) (xp + px) \\ & + \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right) p^2 \\ & + \frac{\delta_0}{\gamma_0} \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right) \left(\frac{1}{x} p + p \frac{1}{x} \right) \\ & - \frac{\eta_0}{\gamma_0^{\frac{1}{2}}} \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{x} \\ & + \frac{\lambda_0}{\gamma_0} \left(\gamma_0 - 4\beta_0 \int_0^t A(t') dt' + 4\alpha_0 \left[\int_0^t A(t') dt' \right]^2 \right) \frac{1}{x^2} \\ & + \frac{2\delta_0}{\gamma_0} \left(\beta_0 - 2\alpha_0 \int_0^t A(t') dt' \right). \end{aligned} \quad (3.22)$$

3.3 Valeurs et états propres de l'invariant

Il reste à obtenir les états et les valeurs propres de l'invariant $I(t)$:

$$I(x, t)\phi_n(x, t) = \varepsilon_n\phi_n(x, t) \quad (3.23)$$

Le point clé pour résoudre cette équation est d'effectuer la transformation unitaire² dépendante du temps suivante :

$$\Phi_n(x) = U(t)\phi_n(x, t), \quad (3.24)$$

où l'opérateur unitaire dépendant du temps $U(t)$ est donné par la forme

$$U(t) = V(t)\Lambda(t) = \exp\left(\frac{i\beta(t)}{2\hbar\gamma_0}x^2\right) \times \exp\left(\frac{i}{2\hbar}\ln\left(\frac{\gamma(t)}{\gamma_0}\right)^{\frac{1}{2}}(xp + px)\right). \quad (3.25)$$

Il est important de noter que à travers cette transformation unitaire, les opérateurs coordonnées et moments conjugués se transforment selon :

$$x \longrightarrow x = U(t)xU(t)^{-1} = \left(\frac{\gamma(t)}{\gamma_0}\right)^{\frac{1}{2}}x, \quad (3.26)$$

$$p \longrightarrow p = U(t)pU(t)^{-1} = \left(\frac{\gamma(t)}{\gamma_0}\right)^{-\frac{1}{2}}\left(p - \frac{\beta(t)}{\gamma_0}x\right). \quad (3.27)$$

Et par conséquent, l'invariant $I(t)$ est transformé en un opérateur indépendant du temps

$$I(t) \longrightarrow I_0 = UIU^{-1} = \gamma_0p^2 + (\alpha_0\gamma_0 - \beta_0^2)x^2 + \delta_0\left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x}\right) + \frac{\lambda_0}{x^2} - \frac{\eta_0}{x}. \quad (3.28)$$

²L'application de cette transformation unitaire nous permettra de ramener l'opérateur invariant dépendant du temps $I(t)$ à un autre invariant indépendant du temps I_0 .

Ainsi, l'équation aux valeurs propres de l'invariant transformé est représentée sous la forme

$$\left(\gamma_0 p^2 + (\alpha_0 \gamma_0 - \beta_0^2) x^2 + \delta_0 \left(\frac{1}{x} p + p \frac{1}{x} \right) + \frac{\lambda_0}{x^2} - \frac{\eta_0}{x} \right) \Phi_n(x) = \varepsilon_n \Phi_n(x). \quad (3.29)$$

Cette dernière est une équation différentielle ordinaire du deuxième ordre pour la fonction d'onde $\Phi_n(x)$. La solution de cette équation différentielle est difficile de point de vue mathématique. Dans ce qui suit on étudie cette équation selon la valeur du coefficient de x^2 , une chose qui va assurer la solution exacte de cette équation et elle nous va conduire à une solution exacte.

Selon les valeurs du coefficient $\omega_0 = (\alpha_0 \gamma_0 - \beta_0^2)$, c'est-à-dire positive, négative ou zéro, on peut distinguer trois cas.

i) Premier cas : $\omega_0 > 0$

Dans ce cas, le système est équivalent à la partie radiale de l'équation de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène en présence d'un champ magnétique fort et arbitraire, laquelle est difficile à résoudre exactement, c'est-à-dire la solution analytique de cette équation est inconnue. Cette situation a été traité par Robnik et Romanovsky [64]. Dans leurs calculs, ils sont décrits les propriétés qualitatives du spectre d'énergie et ils ont employé la méthode semiclassique pour calculer les niveaux d'énergie numériquement. Pour estimer l'état fondamental de l'énergie et les états excités, ils ont utilisé plusieurs méthodes approximatives tels que l'approximation semiclassique, la méthode de perturbation, la méthode variationnelle, et le développement en puissance de Taylor pour le potentiel autour le minimum.

ii) Deuxième cas : $\omega_0 < 0$

Lorsque on introduit la notation positive ϖ tel que $\omega_0 = -\varpi^2 = (i\varpi)^2$, l'équation (3.29) devient

$$\left(\gamma_0 p^2 - \varpi^2 x^2 + \delta_0 \left(\frac{1}{x} p + p \frac{1}{x} \right) + \frac{\lambda_0}{x^2} - \frac{\eta_0}{x} \right) \Phi_n(x) = \varepsilon_n \Phi_n(x). \quad (3.30)$$

Il est clair que cette équation est l'équation radiale inverse de Schrödinger pour l'atome d'hydrogène en présence d'un champ magnétique fort et arbitraire. Néanmoins, il est impossible de la résoudre exactement. Dans le cas où on applique la transformation unitaire $\Lambda_{\frac{\pi}{4}} = \exp\left(i\frac{\pi}{8\hbar}(xp + px)\right)$, la situation est converti au cas $\omega_0 > 0$, laquelle nécessite beaucoup des calculs analytiques.

iii) Troisième cas : $\omega_0 = 0$

Dans ce cas, l'invariant s'écrit sous la forme

$$I_0 = \gamma_0 p^2 + \delta_0 \left(\frac{1}{x} p + p \frac{1}{x} \right) + \frac{\lambda_0}{x^2} - \frac{\eta_0}{x}. \quad (3.31)$$

On peut voir que celle-ci est réellement équivalente à la situation associé au hamiltonien dépendant du temps (3.1), et dans ce cas, il est possible de trouver les états et les fonctions propres de l'invariant I_0 .

L'équation aux états propres de l'invariant I_0 est donné par :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + a \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\eta_0}{\hbar^2 \gamma_0 x} - b \frac{1}{x^2} + \frac{\varepsilon_n}{\hbar^2 \gamma_0} \right) \Phi_n(x) = 0, \quad (3.32)$$

avec $a = \frac{2i\delta_0}{\hbar\gamma_0}$ et $b = \frac{i\delta_0}{\hbar\gamma_0} + \frac{\lambda_0}{\hbar^2\gamma_0}$.

Il convient de noter que pour un système physique décrit par ce genre d'équations (3.32), il existe deux types d'états quantiques différents : les états liés (bound states) et les états de diffusion libres ou quasilibres (scattering states). Les états liés correspondent à une quantification de l'énergie et sont donc associés à un niveau d'énergie particulier. A l'inverse, les états de diffusion sont attachés à un continuum énergétique ; l'énergie n'est plus quantifiée mais peut prendre toutes les valeurs permises de façon continue comme en mécanique classique. Dans notre cas (potentiel de coulomb), les deux types d'états sont présents selon que la solution de l'équation de Schrödinger fournit une énergie négative (états liés) ou positive (états quasi-libres). Dans un état lié, la fonction d'onde est globalement localisée au voisinage du puits de potentiel et décroît de façon exponentielle

plus l'on s'écarte du puits pour finalement tendre vers zéro lorsque x tend vers plus ou moins l'infini. A l'inverse, dans un état quasi-libre la fonction d'onde ne tend pas vers zéro à l'infini mais possède un comportement asymptotique de type onde plane qui correspond à la fonction d'onde d'une particule libre. La complexité du spectre continue³(états de diffusion) du système dans les systèmes dépendants du temps nous a conduit d'étudier le cas du spectre discret (états liés) qui est caractérisé par la condition $\varepsilon_n < 0$.

Pour chercher la solution de l'équation (3.32), nous exprimons la fonction Φ_n sous la forme

$$\Phi_n(x) = x^r e^{qx} \chi_n(x), \quad (3.33)$$

tel que

$$r = \frac{1}{2} - \frac{i\delta_0}{\hbar\gamma_0} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{\delta_0^2}{\hbar^2\gamma_0^2} + \frac{\lambda_0}{\hbar^2\gamma_0}}, \quad (3.34)$$

$$q = \frac{1}{\hbar\gamma_0^{\frac{1}{2}}} \sqrt{-\varepsilon_n}. \quad (3.35)$$

Insérons l'équation (3.33) dans (3.32), on obtient l'équation différentielle

$$y \frac{\partial^2 \chi(y)}{\partial y^2} + (1 + l - y) \frac{\partial \chi(y)}{\partial y} + \frac{1}{2} \left(\frac{-\eta_0}{\hbar^2\gamma_0 q} - l - 1 \right) \chi(y) = 0, \quad (3.36)$$

avec

$$y = -2qx, \quad (3.37)$$

$$l = \sqrt{1 - \frac{4\delta_0^2}{\hbar^2\gamma_0^2} + \frac{4\lambda_0}{\hbar^2\gamma_0}}. \quad (3.38)$$

La solution de cette équation doit diverger à l'infini pas plus vite qu'une puissance finie

³Pour plus des détails sur ce genre du spectre, voir les travaux de M.Maamache et Y.Saâdi : (*arXiv :0804.4077v1[quant-ph]* (2008). *arXiv :0804.4289v1[quant-ph]* (2008). *arXiv :0804.4082v1[quant-ph]* (2008)).

de y , alors qu'elle doit être finie pour $y = 0$. La solution satisfaisant à cette dernière condition est le polynôme de Laguerre⁴ :

$$\chi_n(y) = L_n^l(y), \quad (3.39)$$

d'où

$$n = \frac{1}{2} \left(\frac{-\eta_0}{\hbar\gamma_0^{\frac{1}{2}}\sqrt{-\varepsilon_n}} - l - 1 \right). \quad (3.40)$$

Et par conséquent, l'expression des valeurs propres ε_n de l'invariant I_0 est exactement

$$\varepsilon_n = \frac{-\eta_0^2}{\hbar^2\gamma_0(2n+l+1)^2}. \quad (3.41)$$

Les états propres correspondants sont représentés sous la forme

$$\begin{aligned} \Phi_n(x) = & \left[(2n+l+1)^{l+3} \frac{\Gamma(n+l+1)}{\Gamma(n+1)} \left(\frac{\hbar^2\gamma_0}{2\eta_0} \right)^{l+2} \right]^{-\frac{1}{2}} x^{\frac{l}{2} + \frac{1}{2} - \frac{i\delta_0}{\hbar\gamma_0}} \\ & \exp\left(\frac{-\eta_0}{\hbar^2\gamma_0(2n+l+1)} x \right) \times L_n^l\left(\frac{2\eta_0}{\hbar^2\gamma_0(2n+l+1)} x \right). \end{aligned} \quad (3.42)$$

Finalement, Les états normalisés de l'invariant $I(t)$ sont ceux évalué par l'application de

⁴On peut exprimer la solution de cette équation sous la forme de la fonction hypergéométrique dégénérée

$$F\left(\frac{1}{2}\left(\frac{\eta_0}{\hbar^2\gamma_0} + l + 1\right), l + 1, y\right).$$

la transformation unitaire U^{-1} sur l'état $\Phi_n(x)$, d'où on peut l'écrire sous la forme

$$\begin{aligned}
\phi_n(x, t) &= U^{-1}\Phi_n(x) = \Lambda^{-1}V^{-1}\Phi_n(x) \\
&= \left[(2n+l+1)^{l+3} \frac{\Gamma(n+l+1)}{\Gamma(n+1)} \left(\frac{\hbar^2\gamma(t)}{2\eta(t)} \right)^{l+2} \right]^{-\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \left(\frac{\gamma(t)}{\gamma_0} \right)^{\frac{i\delta_0}{2\hbar\gamma_0}} x^{\frac{l}{2}+\frac{1}{2}-\frac{i\delta_0}{\hbar\gamma_0}} \exp\left(\frac{i\beta(t)}{2\hbar\gamma(t)}x^2 \right) \\
&\quad \times \exp\left(\frac{-\eta(t)}{\hbar^2\gamma(t)(2n+l+1)}x \right) \times L_n^l\left(\frac{2\eta(t)}{\hbar^2\gamma(t)(2n+l+1)}x \right).
\end{aligned} \tag{3.43}$$

3.4 Calcul de la phase total et la solution de l'équation de Schrödinger

Il nous reste à déterminer la phase $\theta_n(t)$ qui satisfait l'équation :

$$\hbar \frac{d}{dt}\theta_n(t) = \langle \phi_n(x, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) | \phi_n(x, t) \rangle, \tag{3.44}$$

Appliquons la transformation unitaire $U(t)$ à gauche et à droite de cette dernière équation, on obtient la relation

$$\hbar \frac{d}{dt}\theta_n(t) = \langle \Phi_n(x) | -\frac{A(t)}{\gamma(t)}I_0 - \frac{\delta_0\dot{\gamma}(t)}{2\gamma_0\gamma(t)} | \Phi_n(x) \rangle. \tag{3.45}$$

Substituons les équations (3.23) et (3.41) dans (3.45), nous obtenons la phase associée au hamiltonien H sous la forme

$$\theta_n(t) = \frac{\eta_0^2}{\hbar^3\gamma_0(2n+l+1)^2} \int_0^t \frac{A(t')}{\gamma(t')} dt' - i \ln \left(\frac{\gamma(t)}{\gamma_0} \right)^{-\frac{i\delta_0}{2\hbar\gamma_0}}. \tag{3.46}$$

Et finalement la solution exacte de l'équation de Schrödinger (1.1) associée au hamiltonien $H(x, p, t)$ est

$$\begin{aligned}
\psi_n(x, t) = & \left[(2n + l + 1)^{l+3} \frac{\Gamma(n + l + 1)}{\Gamma(n + 1)} \left(\frac{\hbar^2 \gamma(t)}{2\eta(t)} \right)^{l+2} \right]^{-\frac{1}{2}} x^{\frac{l}{2} + \frac{1}{2} - \frac{i\delta_0}{\hbar\gamma_0}} \\
& \times \exp\left(\frac{i\beta(t)}{2\hbar\gamma(t)} x^2\right) \times \exp\left(\frac{-\eta(t)}{\hbar^2 \gamma(t)(2n + l + 1)} x\right) \\
& \times \exp\left(\frac{i\eta_0^2}{\hbar^3 \gamma_0 (2n + l + 1)^2} \int_0^t \frac{A(t')}{\gamma(t')} dt'\right) \\
& \times L_n^l\left(\frac{2\eta(t)}{\hbar^2 \gamma(t)(2n + l + 1)} x\right). \tag{3.47}
\end{aligned}$$

3.5 Applications et discussion

Pour illustrer notre calcul, nous l'appliquons à des cas spécifiques :

i) Les atomes hydrogénoïdes

Comme il a été souligné dans l'introduction de ce chapitre, l'atome d'hydrogène et les atomes hydrogénoïdes sont les modèles typiques du potentiel coulombien. Lorsqu'on prend $A(t) = (1/2m_e)$ et $Z(t) = (e^2/4\pi\epsilon_0)$, les fonctions d'ondes $\psi_n(x, t)$ deviennent exactement les mêmes que celles de l'équation radiale de l'atome d'hydrogène dans le cas stationnaire [65]. Aussi, dans le cas où $A(t) = (1/2\mu)$ et $Z(t) = (Ze^2/4\pi\epsilon_0)$, notre problème est équivalent au cas des atomes hydrogénoïdes.

ii) Le potentiel coulombien à une dimension

Dans le cas où $C(t) = 0$ et $E(t) = 0$, le system est équivalent au potentiel coulombien dépendant du temps à une dimension dans la région $x > 0$. À cause de la singularité du potentiel à l'origine, on peut obtenir les solutions séparément dans deux régions $x > 0$ et $x < 0$. Puisque $A(t)p^2 - Z(t)/|x|$ est symétrique pour les deux régions, les solutions du cas $x > 0$ peuvent s'étendre au cas $x < 0$ afin que nous obtenons la solution régulière sous la forme :

$$\begin{aligned}
\psi_n(x, t) = & \left[(2n+2)^4 \frac{\Gamma(n+2)}{\Gamma(n+1)} \left(\frac{\hbar^2 \gamma(t)}{2\eta(t)} \right)^3 \right]^{-\frac{1}{2}} x \\
& \times \exp\left(\frac{i\beta(t)}{2\hbar\gamma(t)} |x^2| \right) \times \exp\left(\frac{-\eta(t)}{\hbar^2 \gamma(t)(2n+2)} |x| \right) \\
& \times \exp\left(\frac{i\eta_0^2}{\hbar^3 \gamma_0 (2n+2)^2} \int_0^t \frac{A(t')}{\gamma(t')} dt' \right) \\
& \times L_n^1\left(\frac{2\eta(t)}{\hbar^2 \gamma(t)(2n+2)} |x| \right). \tag{3.48}
\end{aligned}$$

Si on prend $A = \text{const.}$ et $Z = \text{const.}$, l'expression (3.48) est équivalent à la solution régulière de l'équation de Schrödinger stationnaire pour un potentiel coulombien à une dimension [66-70].

iii) Le potentiel coulombien à masse dépendante du temps

Les résultats que nous avons obtenu peuvent s'appliquer au problème du potentiel coulombien à masse dépendante du temps. En effet, le système hamiltonien avec masse dépendante du temps avait connu différentes applications dans plusieurs domaines de physique. On cite par exemple le travail de Colegarve et Abdalla qui ont utilisé le problème de l'oscillateur harmonique à masse dépendante du temps dans l'étude du problème de la cavité de Feby-Perot qui interagit avec un réservoir calorique [71]. Aussi, Mandal a investi le comportement non classique de la lumière cohérente couplée avec un oscillateur par l'introduction d'un modèle d'oscillateur à masse et fréquence dépendantes du temps [72].

Dans notre cas, nous prenons la masse sous la forme $m(t) = m_0 e^{-\kappa t}$ tel que m_0 et κ sont des constantes réelles. De plus, nous choisissons les coefficients dépendants du temps sous la forme $A(t) = 1/(2m(t))$, $C(t) = C_0 e^{\kappa t}$, $E(t) = E_0 e^{\kappa t}$, et $Z(t) = km(t)$ avec C_0 , E_0 , et k sont des constantes réelles. Alors, l'hamiltonien de l'équation (3.1) peut s'écrire

sous la forme

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0 e^{-\kappa t}} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2iC_0 \hbar e^{\kappa t} \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} + (E_0 + iC_0 \hbar) e^{\kappa t} \frac{1}{x^2} - e^{-\kappa t} \frac{m_0 k}{x}. \quad (3.49)$$

Dans ce cas, il est possible d'intégrer le terme $\int_0^t A(t') dt'$ qui apparaît dans les équations (3.16)-(3.21) pour arriver à la solution exacte du problème correspondant à l'hamiltonien (3.49), laquelle est donnée par

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \left[(2n + l + 1)^{l+3} \frac{\Gamma(n + l + 1)}{\Gamma(n + 1)} \left(\frac{\hbar^2 \Pi_1(t)}{2\eta_0} \right)^{l+2} \right]^{-\frac{1}{2}} x^{\frac{l}{2} + \frac{1}{2} - \frac{i\delta_0}{\hbar\gamma_0}} \\ &\times \exp\left(\frac{i\Pi_2(t)}{2\hbar} x^2\right) \times \exp\left(\frac{-\eta_0}{\hbar^2 \Pi_1(t)(2n + l + 1)} x\right) \\ &\times \exp\left(\frac{i\eta_0^2}{2m_0 \hbar^3 (2n + l + 1)^2} \int_0^t \frac{dt'}{\Pi_1^2(t') e^{-\kappa t'}}\right) \\ &\times L_n^l\left(\frac{2\eta_0}{\hbar^2 \Pi_1(t)(2n + l + 1)} x\right), \end{aligned} \quad (3.50)$$

tel que

$$\Pi_1(t) = \left[\gamma_0 \left(\gamma_0 - \frac{2\beta_0}{m_0 \kappa} (e^{\kappa t} - 1) + \frac{\alpha_0}{m_0^2 \kappa^2} (e^{\kappa t} - 1)^2 \right) \right]^{1/2}, \quad (3.51)$$

$$\Pi_2(t) = \frac{\gamma_0}{\Pi_1^2} \left(\beta_0 - \frac{\alpha_0}{m_0 \kappa} (e^{\kappa t} - 1) \right). \quad (3.52)$$

Pour $t \rightarrow 0$, les deux équations (3.51) et (3.52) se réduisent aux $\Pi_1(t) = \gamma_0$ et $\Pi_2(t) = \beta_0/\gamma_0$ et, par conséquent, l'équation résultante (3.50) devient exactement l'analogue de celle du cas stationnaire. Quoique notre étude a été réalisé dans la situation où le système étudié est à une dimension, il est possible d'appliquer notre développement pour des modèles à plusieurs dimensions⁵[41,73].

⁵C'est-à-dire les systèmes à N dimensions.

Chapitre 4

Solution exacte de l'équation de

Schrödinger pour un oscillateur

singulier plus le terme $(1/x)p + p(1/x)$

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous traitons le problème d'un système physique décrit par l'hamiltonien [31] :

$$H(x, p, t) = A(t)p^2 + B(t)(xp + px) + D(t)x^2 + \frac{E(t)}{x^2} + C(t) \left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x} \right) \quad (4.1)$$

pas souvent étudié dans la littérature. Les paramètres $A(t) - C(t)$ sont des fonctions dépendantes du temps et le terme $C(t) \left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x} \right)$ donne le terme $\frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x}$ qui apparaît dans la partie radiale de l'équation de Schrödinger décrivant l'évolution des systèmes quantiques à N corps [74]. Cet hamiltonien a été étudié pour la première fois par J.R. Choi [32] à l'aide de la théorie des invariants. C'est cette dérivation, et notamment la méthode utilisée pour obtenir la solution exacte de l'équation de Schrödinger (1.1) qui est commenté de manière critique dans l'article figurant à la fin de ce chapitre.

4.2 Construction de l'invariant

Pour obtenir un invariant associé au système quantique décrit par l'hamiltonien (4.1), on fait la transformation unitaire dépendante du temps

$$\psi(x, t) = U(t)\tilde{\psi}(x, t), \quad (4.2)$$

tel que

$$U(t) = \exp \frac{i}{\hbar} \int \frac{2C(t)B(t)}{A(t)} dt. \quad (4.3)$$

Sous cette transformation unitaire l'équation de Schrödinger (1.1) devient

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(x, t) = \tilde{H} \tilde{\psi}(x, t), \quad (4.4)$$

où le nouveau hamiltonien

$$\tilde{H}(x, p, t) = U(t)^{-1} H(x, p, t) U(t) - i\hbar U(t)^{-1} \frac{\partial}{\partial t} U(t), \quad (4.5)$$

s'écrit sous la forme :

$$\tilde{H}(x, p, t) = H(x, p, t) + \frac{2C(t)B(t)}{A(t)}. \quad (4.6)$$

Les conditions : $E(t)/A(t) = \text{const}$ et $C(t)/A(t) = \text{const}$, nous permettrons d'écrire

l'hamiltonien $\tilde{H}(x, p, t)$ sous forme d'une combinaison linéaire des générateurs du groupe algébrique de Lie $SU(1, 1)$ ¹

$$\tilde{H} = A(t)T_1 + B(t)T_2 + C(t)T_3, \quad (4.7)$$

¹Nous proposons donc une nouvelle méthode algébrique $SU(1,1)$. On aimerait exploiter la force de cette méthode pour élaborer l'invariant d'une manière simple et rapide.

avec

$$\begin{aligned}
T_1 &= p^2 + \frac{E}{A} \frac{1}{x^2} + \frac{C}{A} \left(\frac{1}{x} p + p \frac{1}{x} \right) \\
T_2 &= xp + px + \frac{2C}{A} \\
T_3 &= x^2,
\end{aligned} \tag{4.8}$$

où

$$\begin{aligned}
[T_1, T_2] &= -4i\hbar T_1 \\
[T_2, T_3] &= -4i\hbar T_3 \\
[T_3, T_1] &= 2i\hbar T_2.
\end{aligned} \tag{4.9}$$

On note que l'algèbre formée par les générateurs $\{T_1, T_2, T_3\}$ est identique à celle d'un oscillateur. Alors, nous cherchons l'invariant sous la forme :

$I(t)$

$$I(t) = \mu_1(t)T_1 + \mu_2(t)T_2 + \mu_3(t)T_3. \tag{4.10}$$

En utilisant l'équation (2.19), nous obtenons les relations qui relient les coefficients $\mu_r(t)$ de l'expression (4.10) sous la forme :

$$\begin{aligned}
\dot{\mu}_1(t) &= 4(B\mu_1(t) - A\mu_2(t)) \\
\dot{\mu}_2(t) &= 2(D\mu_1(t) - A\mu_3(t)) \\
\dot{\mu}_3(t) &= 4(D\mu_2(t) - B\mu_3(t)).
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Le choix $\mu_1(t) = \rho^2(t)$ conduit à l'équation non linéaire de Pinney [75] satisfaite par $\rho(t)$:

$$\ddot{\rho}(t) - \frac{\dot{A}}{A}\dot{\rho}(t) + 2 \left(2AD + \frac{\dot{A}B}{A} - 2B^2 - \dot{B} \right) \rho(t) = 4EA \frac{1}{\rho^3(t)} \tag{4.12}$$

et par conséquent

$$\begin{aligned}\mu_2(t) &= \frac{1}{2A} \left(2B\rho^2(t) - \dot{\rho}(t)\rho(t) \right), \\ \mu_3(t) &= \frac{1}{4A^2} \left(2B\rho(t) - \dot{\rho}(t) \right)^2 + \frac{E}{A} \frac{1}{\rho^2(t)}.\end{aligned}\tag{4.13}$$

Finalement l'invariant s'écrit

$$\begin{aligned}I(t) &= \rho^2(t) \left(p^2 + \frac{E}{A} \frac{1}{x^2} + \frac{C}{A} \left(\frac{1}{x} p + p \frac{1}{x} \right) \right) \\ &+ \left(\frac{1}{4A^2} \left(2B\rho(t) - \dot{\rho}(t) \right)^2 + \frac{E}{A} \frac{1}{\rho^2(t)} \right) x^2 \\ &+ \frac{1}{2A} \left(2B\rho^2(t) - \dot{\rho}(t)\rho(t) \right) \left(xp + px + \frac{2C}{A} \right).\end{aligned}\tag{4.14}$$

4.3 Valeurs et états propres de l'invariant

Pour obtenir la solution exacte de l'équation de Schrödinger (1.1) :

i) il faut résoudre l'équation aux valeurs propres :

$$I(x, t)\phi_n(x, t) = \lambda_n\phi_n(x, t),\tag{4.15}$$

où λ_n sont des valeurs propres constantes de $I(t)$ et les états $\phi_n(x, t)$ sont les vecteurs propres correspondants.

ii) il faut déterminer la phase $\alpha_n(t)$ vérifiant l'équation

$$\hbar \frac{d}{dt} \alpha_n(t) = \langle \phi_n(x, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \tilde{H}(t) | \phi_n(x, t) \rangle,\tag{4.16}$$

On introduit la transformation unitaire dépendante du temps

$$\Phi_n(x) = S(t)\phi_n(x, t), \quad (4.17)$$

où l'opérateur S est donné par :

$$S(t) = \exp\left(\frac{i \ln \rho(t)}{2\hbar}(xp + px)\right) \times \exp\left(\frac{i\mu_2}{2\hbar\mu_1}x^2\right). \quad (4.18)$$

Dans ce cas l'invariant $I(t)$ se transforme en un nouveau invariant indépendant du temps $I' = SIS^{-1}$ et les équations aux valeurs propres (4.15) se transforment en :

$$I'\Phi_n(x) = \left(p^2 + \frac{E}{A} \frac{1}{x^2} + \frac{E}{A}x^2 + \frac{C}{A} \left(\frac{1}{x}p + p\frac{1}{x}\right)\right) \Phi_n(x) = \lambda_n \Phi_n(x), \quad (4.19)$$

où nous avons utilisé les deux relations connus :

$$SxS^{-1} = \rho x, \quad (4.20)$$

$$SpS^{-1} = \frac{p}{\rho} - \frac{\mu_2}{\mu_1}\rho x. \quad (4.21)$$

Le problème étudié est réduit à un problème à une dimension indépendant du temps

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + a\frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x} - cx^2 - d\frac{1}{x^2} + \frac{\lambda_n}{\hbar^2}\right) \Phi_n(x) = 0, \quad (4.22)$$

tel que $a = \frac{2iC}{\hbar A}$, $c = \frac{E}{\hbar^2 A}$ et $d = \frac{E+i\hbar C}{\hbar^2 A}$. Cette dernière équation est équivalente à l'équation radiale d'un oscillateur harmonique à deux dimensions en présence de l'effet Aharonov-Bohm [49,76]. Pour chercher les solutions de l'équation différentielle (4.22), effectuons le changement de variable suivant

$$y = x^2 \quad (4.23)$$

et introduisons ensuite le changement

$$\Phi_n(y) = y^k e^{qy} \chi_n(y), \quad (4.24)$$

tel que k et q sont des constantes données par les deux expressions :

$$k = \frac{1}{4} - \frac{iC}{2\hbar A} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{E}{\hbar^2 A} - \frac{C^2}{\hbar^2 A^2}}, \quad (4.25)$$

$$q = -\frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}}. \quad (4.26)$$

Insérons l'équation (4.24) dans (4.22) , on obtient une équation différentielle bien connue :

$$\xi \frac{\partial^2 \chi(\xi)}{\partial \xi^2} + (1 + m - \xi) \frac{\partial \chi(\xi)}{\partial \xi} + \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_n}{2\hbar} \sqrt{\frac{A}{E}} - m - 1 \right) \chi(\xi) = 0 \quad (4.27)$$

avec

$$\xi = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} y, \quad (4.28)$$

$$m = \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{E}{\hbar^2 A} - \frac{C^2}{\hbar^2 A^2}}. \quad (4.29)$$

Cette dernière équation (4.27) s'écrit sous une forme hypergéométrique qui admet comme solution le polynôme de Laguerre, dont on peut exprimer $\chi_n(\xi)$ par :

$$\chi_n(\xi) = L_n^m(\xi) \quad (4.30)$$

tel que

$$n = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_n}{2\hbar} \sqrt{\frac{A}{E}} - m - 1 \right) \quad (4.31)$$

et par conséquent la valeur propre λ_n est exactement donnée par

$$\lambda_n = 2\hbar\sqrt{\frac{E}{A}}(2n + m + 1), \quad (4.32)$$

et les vecteurs propres correspondants sont donnés par

$$\begin{aligned} \Phi_n(x) &= \left[\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+m+1)} \left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} \right)^{m+1} \right]^{\frac{1}{2}} \times x^{m+\frac{1}{2}-\frac{iC}{\hbar A}} \\ &\quad \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} x^2\right) \times L_n^m\left(\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{E}{A}} x^2\right). \end{aligned} \quad (4.33)$$

En utilisant la relation qui représente l'action de l'opérateur $S(t)$ sur l'état $\phi_n(x, t)$:

$$S^{-1}(t)\phi_n(x, t) = \exp\left(-\frac{\ln \rho(t)}{2}\right) \times \exp\left(-\frac{i\mu_2}{2\hbar\mu_1} x^2\right) \phi_n\left(\frac{1}{\rho} x, t\right), \quad (4.34)$$

on obtient les états propres de l'invariant $I(t)$ sous la forme :

$$\begin{aligned} \phi_n(x, t) &= S^{-1}\Phi_n(x) \\ &= \left[\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+m+1)} \left(\frac{1}{\hbar\rho^2} \sqrt{\frac{E}{A}} \right)^{m+1} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\rho}\right)^{-\frac{iC}{\hbar A}} \times x^{m+\frac{1}{2}-\frac{iC}{\hbar A}} \\ &\quad \times \exp\left\{-\frac{1}{4} \left[\frac{i}{\hbar A} \left(2B - \frac{\dot{\rho}}{\rho} \right) + \frac{2}{\hbar\rho^2} \sqrt{\frac{E}{A}} \right] x^2\right\} \\ &\quad \times L_n^m\left(\frac{1}{\hbar\rho^2} \sqrt{\frac{E}{A}} x^2\right). \end{aligned} \quad (4.35)$$

4.4 Calcul de la phase totale et la solution de l'équation de Schrödinger

Il nous reste à déterminer la phase $\alpha_n(t)$ qui satisfait l'équation (4.16). Appliquons la transformation unitaire $S(t)$ à gauche et à droite de l'équation (4.16) et utilisons

l'équation auxiliaire de Pinney²(4.12) on obtient la relation

$$\hbar \frac{d}{dt} \alpha_n(t) = \langle \Phi_n(x) | -\frac{A}{\rho^2} I' - \frac{C}{A} \frac{\dot{\rho}}{\rho} | \Phi_n(x) \rangle. \quad (4.36)$$

Substituons les équations (4.15) et (4.32) dans (4.36), nous obtenons la phase associée à l'hamiltonien \tilde{H} sous la forme

$$\alpha_n(t) = -2(2n + m + 1) \int_0^t \frac{\sqrt{E(t')A(t')}}{\rho^2(t')} dt' - \frac{C}{\hbar A} \int_0^t \frac{\dot{\rho}(t')}{\rho(t')} dt'. \quad (4.37)$$

Et finalement la solution exacte de l'équation de Schrödinger (1.1) associée à l'hamiltonien $H(x, p, t)$ est

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= U(t) \tilde{\psi}_n(x, t) = \left[\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+m+1)} \left(\frac{1}{\hbar \rho^2} \sqrt{\frac{E}{A}} \right)^{m+1} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\rho(0)} \right)^{-\frac{iC}{\hbar A}} x^{m+\frac{1}{2}-\frac{iC}{\hbar A}} \\ &\times \exp \left\{ -\frac{1}{4} \left[\frac{i}{\hbar A} \left(2B - \frac{\dot{\rho}}{\rho} \right) + \frac{2}{\hbar \rho^2} \sqrt{\frac{E}{A}} \right] x^2 \right\} \times L_n^m \left(\frac{1}{\hbar \rho^2} \sqrt{\frac{E}{A}} x^2 \right) \\ &\times \exp \left\{ -2i(2n+m+1) \int_0^t \frac{\sqrt{E(t')A(t')}}{\rho^2(t')} dt' + \frac{i}{\hbar} \int_0^t \frac{2CB}{A} dt' \right\}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

où la phase totale est donnée par l'expression :

$$\theta_n(t) = -2(2n+m+1) \int_0^t \frac{\sqrt{E(t')A(t')}}{\rho^2(t')} dt' + \frac{1}{\hbar} \int_0^t \frac{2CB}{A} dt'. \quad (4.39)$$

Nous avons obtenu la solution exacte de l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien dépendant du temps (4.1), et nous avons montré que celle qui a été obtenue par Choi [32], ne représente pas une solution de l'équation de Schrödinger (1.1). La cause essentielle de l'erreur de Choi réside dans le calcul de la phase et par conséquent dans la solution de l'équation de Schrödinger (1.1).

²On utilise l'équation de pinney pour éliminer le terme $D(t)$ de \tilde{H} .

Conclusion

Dans la première partie du travail, nous avons étudié pour la première fois le potentiel coulombien dépendant du temps dans le contexte des systèmes dépendants du temps. Nous avons trouvé un invariant $I(t)$ associé à ce système, ainsi que ses valeurs propres et les vecteurs propres correspondants. Nous avons déterminé la solution de l'équation de Schrödinger après le calcul de la phase associée aux états de référence de l'invariant $I(t)$.

Ce modèle trouve ses applications, entre autres, dans trois systèmes différents tels que :

- 1- Les atomes hydrogénoïdes.
- 2- Le potentiel coulombien à une dimension.
- 3- Le potentiel coulombien à masse dépendante du temps.

Dans la deuxième partie, Nous avons refait le même calcul pour un oscillateur singulier plus un terme symétrique $(1/x)p + p(1/x)$. La différence entre les deux calculs se situe dans la construction de l'invariant qui a été faite dans la deuxième partie par la méthode algébrique des générateurs du groupe de Lie $SU(1,1)$.

Nous espérons que les deux modèles qu'on a étudié trouvent leurs applications dans différents domaines de la physique et de la chimie et surtout les phénomènes qui ont une relation directe avec la variation de la charge et la masse en fonction du temps.

La généralisation de cette solution à une dimension à $N \geq 2$ degrés de liberté pourra faire l'objet de prochaines investigations.

Annexe

Cette annexe reprend quelques propriétés sur les Polynômes de Laguerre et des relations de commutations utiles pour les calculs des invariants dans les chapitres III et IV.

1- Polynômes de Laguerre :

Equation différentielle :

L'équation différentielle pour les polynômes de Laguerre $L_n^\alpha(z)$

$$zy'' + (1 + \alpha - z)y' + ny = 0 \quad (\text{A.1})$$

admet une solution particulière

$$y(z) = F(-n, 1 + \alpha, z) \quad (\text{A.2})$$

qui est un polynôme. Aussi

$$L_n^\alpha(z) = C_n F(-n, 1 + \alpha, z). \quad (\text{A.3})$$

tel que $F(-n, 1 + \alpha, z)$ est une fonction hypergéométrique dégénérée.

Pour déterminer la constante C_n , on pose $z = 0$. Il vient alors

$$L_n^\alpha(z) = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n! \Gamma(n + 1)} F(-n, 1 + \alpha, z). \quad (\text{A.4})$$

On peut écrire la fonction hypergéométrique dégénérée sous la forme intégrable :

$$F(\alpha, \gamma, z) = \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\gamma - \alpha)} \int_0^1 t^{\alpha-1} (1-t)^{\gamma-\alpha-1} e^{zt} dt. \quad (\text{A.5})$$

Développement en série :

Le polynôme de Laguerre $L_n^\alpha(z)$ s'écrit sous la forme d'une série

$$L_n^\alpha(z) = \frac{1}{n!} e^z z^{-\alpha} \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^{n+\alpha}) \quad (\text{A.6})$$

$$= \sum_{m=0}^n (-1)^m \frac{(n+\alpha)!}{m!(n-m)!(m+\alpha)!} z^m \quad (\text{A.7})$$

Dans le cas où $\alpha = 0$, le polynôme de Laguerre généralisé se réduit au polynôme de Laguerre $L_n^0(z)$.

Relations de récurrence :

$$L_n^\alpha(z) = L_n^{\alpha-1}(z) + L_{n-1}^\alpha(z) \quad (\text{A.8})$$

$$L_n^\alpha(z) = \frac{d}{dz} (L_n^\alpha(z) - L_{n+1}^\alpha(z)) \quad (\text{A.9})$$

$$\frac{d}{dz} L_n^\alpha(z) = -L_{n-1}^{\alpha+1}(z) \quad (\text{A.10})$$

$$\alpha L_n^\alpha(z) = (n+\alpha) L_n^{\alpha-1}(z) - z \frac{d}{dz} L_n^\alpha(z) \quad (\text{A.11})$$

$$(n+1) L_{n+1}^\alpha(z) = (2n+\alpha+1-z) L_n^\alpha(z) - (n+\alpha) L_{n-1}^\alpha(z) \quad (\text{A.12})$$

$$L_n^{-\alpha}(z) = (-1)^\alpha \frac{(n-\alpha)!}{n!} z^\alpha L_{n-\alpha}^\alpha(z) \text{ avec } (n=1, 2, 3, \dots) \quad (\text{A.13})$$

Cas particuliers :

$$L_0^\alpha(z) = 1, \quad L_1^\alpha(z) = \alpha + 1 - z \quad (\text{A.14})$$

$$L_1(z) = 1 - z, \quad L_2(z) = 1 - 2z + \frac{z^2}{2} \quad (\text{A.15})$$

$$L_n^\alpha(0) = \frac{(n+\alpha)!}{n! \alpha!} \quad (\text{A.16})$$

$$L_n^{-n}(z) = (-1)^n \frac{z^n}{n!} \quad (\text{A.17})$$

Relation d'orthonormalisation :

Le polynôme de Laguerre vérifie la relation d'orthonormalisation en poids $z^\alpha e^{-z}$:

$$\int_0^\infty z^\alpha e^{-z} L_n^\alpha(z) L_m^\alpha(z) dz = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \delta_{nm}, \quad (\text{Re } \alpha > 0). \quad (\text{A.18})$$

Addition des Polynômes :

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n^\alpha(z)x^n = (1-x)^{-\alpha-1} \exp\left(\frac{zx}{x-1}\right), \text{ pour } |x| < 1 \quad (\text{A.19})$$

$$\sum_{m=0}^n L_m^\alpha(z) = L_n^{\alpha+1}(z) \quad (\text{A.20})$$

$$\sum_{m=0}^n L_m^\alpha(z)L_{n-m}^\beta(x) = L_n^{\alpha+\beta+1}(z+x) \quad (\text{A.21})$$

$$e^x \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^k}{k!} L_n^{\alpha+k}(x) = L_n^\alpha(x) \quad (\text{A.22})$$

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{\Gamma(n+\alpha+1)} L_n^\alpha(x)L_n^\alpha(y)z^n &= (1-z)^{-1} \exp\left(-z\frac{x+y}{1-z}\right) \\ &\times (xyz)^{-\alpha/2} I_\alpha \left[2\frac{(xyz)^{1/2}}{1-z} \right], \quad |z| < 1 \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

tel que I_α représente la fonction de Bessel définie par :

$$I_\alpha(x) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{x}{2}\right)^{2j+\alpha} \frac{1}{\Gamma(j+1)\Gamma(j+\alpha+1)}. \quad (\text{A.24})$$

Relation avec le polynôme d' Hermite :

$$H_{2n}(z) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} F\left(-n, \frac{1}{2}; z^2\right) = (-1)^n 2^{2n} n! L_n^{-\frac{1}{2}}(z^2) \quad (\text{A.25})$$

$$H_{2n+1}(z) = (-1)^n \frac{2(2n+1)!}{n!} F\left(-n, \frac{3}{2}; z^2\right) = (-1)^n 2^{2n+1} n! z L_n^{\frac{1}{2}}(z^2) \quad (\text{A.26})$$

Bibliographie

- [1] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. London. A* **392** (1984) 124.
- [2] A. Messiah, *Mécanique quantique T2*, (Dunod, Paris, 1995).
- [3] H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, *J. Math. Phys* **10** (1969) 1458.
- [4] A. M. Markov, *Invariants and the Evolution of Nonstationary Quantum Systems*, (Nova Science Publishers, Commack, New-York, 1989).
- [5] C-In. Um, K-H. Yeon and T. F. George, *Phys. Rep.* **362** (2002) 63.
- [6] I. A. Pedrosa and I. Guedes, *Int. J. Mod. Phys. B* **17** (2003) 2903.
- [7] J. R. Choi and Bo. Ha. Kweon, *Int. J. Mod. Phys. B* **16** (2002) 4733.
- [8] M. Maamache M, J. P. Provost and G. Vallée, *Phys. Rev. A* **59** (1999)1777.
- [9] M. Maamache and H. Choutri, *J. Phys. A : Math. Gen.* **33** (2000) 6203.
- [10] M. Maamache, *Phys. Rev. A* **52** (1995) 936.
- [11] I. A. Pedrosa, G. P. Serra and I. Guedes, *Phys. Rev. A* **56** (1997) 4300.
- [12] D. A. Trifonov, *J. Phys. A : Math. Gen.* **32** (1999) 3649.
- [13] V. V. Dodonov, V. I. Man'ko, L. Rosa, *Phys. Rev. A* **57** (1998) 2851.
- [14] M. Maamache, *Phys. Rev. A* **29** (1996) 2833.
- [15] M. Maamache, *Phys. Rev. A* **61** (2000) 026102.
- [16] J. R. Choi, *Int. J.Th. Phys.* **43** (2004) 947; *Phys. Lett. A* **325** (2004) 1.
- [17] V. V. Dodonov, I. A. Malkin and V. I. Man'ko, *Nuovo Cimento B* **24** (1974)46.
- [18] J. H. Gweon and J. R. Choi, *J. Kor. Phys. Soc*, Vol. 42, No.3 (2003) 325.
- [19] D-Y. Song, *Phys. Rev. A* **62** (2000) 14103.
- [20] D-Y. Song, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1141.
- [21] K. H. Yeon, D. H. Kim, C. I. Um, T. F. George and L. N. Pandey, *Phys. Rev. A* **55** (1997) 023.
- [22] I. Guedes, *Phys. Rev. A* **63**, 034102 (2001).
- [23] J. Bauer, *Phys. Rev. A* **65** (2002) 036101.
- [24] H. Bekkar, F. Benamira and M. Maamache, *Phys. Rev. A* **68** (2003) 016101.
- [25] Pi-G. Luan and C. S. Tang, *Phys. Rev. A* **71** (2005) 1.

- [26] C. J. Garrison and E. M. Wright, *Phys. Lett. A* **128** (1988) 177.
- [27] M. Maamache, A. Bounames and N. Ferkous, *Phys. Rev. A* **731**, (2006) 016101.
- [28] B. Bascia, S. S. Mizrahi and M. H. Moussa, *Phys. Rev. A* **49** (1992) 5885.
- [29] M. Sebawe Abdalla, *Phys. Rev. A* **37** (1988) 4026.
- [30] S. Menouar, M. Maamache, Y. Saâdi and J. R. Choi, *Phys. A : Math. Theor.* **41** (2008) 215303.
- [31] M. Maamache, S. Menouar and L. Krache, *Int. J.Th. Phys.* **45** (2006) 2223.
- [32] J. R. Choi, *Int. J.Th. Phys.* **42** (2003) 853.
- [33] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, (Addison-Wesley, 1980).
- [34] L. Landau, E. Lifchitz, *Mécanique*, (Éditions Mir, Moscou, 1988)
- [35] W. Greiner, *Quantum Mechanics : 4 Ed* , (Springer, Germany, 2000) .
- [36] A. Messiah, *Mécanique Quantique*, T1 (Dunod, Paris, 1995) .
- [37] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique* T1,(Hermann, Paris, 1977).
- [38] M. Wagner, *Unitary transformations in solid- state physics*, (Elsevier Science Publisher, New York, 1986).
- [39] M. Maamache, *J. Math. Phys.* **39** 161 (1998)161.
- [40] H. G. Muller and A. Tip, *Phys. Rev. A* **30** (1984) 3039.
- [41] C.J. Efthimiou and D. Spector, *Phys. Rev. A* **49** (1994) 2301.
- [42] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique* T2, (Hermann, Paris, 1977).
- [43] H. R. Lewis, J. W. Bates and J. M. Finn, *Phys. Lett. A* **215** (1996) 160.
- [44] H. R. Lewis and W. E. Lawrence, *Phys. Rev. A* **55** (1997) 2617.
- [45] F. M. Fernández, *Phys. Lett. A* **242** (1998) 4.
- [46] L. D. Landau, E. Lifchiz, *Mécanique quantique*, (Editions Mir, Moscou 1967).
- [47] M. Born, *The statistical interpretation of quantum mechanics*, (Nobel Lecture, 1954).
- [48] M. Maamache, *Thèse de Doctorat d'état*, (Université de Sétif, 1994).

- [49] Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115** (1959) 4859 .
- [50] A. Tomita and R. Y. Chiao, *Phys. Rev. Lett.* **57** (1986) 937.
- [51] Y. Aharonov and J. Anandan, *Phys. Rev. Lett.* **58** (1987) 1593
- [52] D. J. Moore and G. E. Sredamn, *J. Phys. A : Math. Gen.* **23** (1990) 2049.
- [53] G. Dattoli, R. Mignani, and A.Torre, *J. Phys. A. Math. Gen.* **23** (1990) 5795,
- [54] C. Miniatura, C. Sire, J. Bandon and J. Bellissard *Euro. Phys. Lett* **13** (1990)199.
- [55] A. Mostafazadeh. *Phys. lett. A* **264** (1999) 11.
- [56] Gao. X. C, J. B. Xu, and T. Z. Qian, *Phys. Rev. A* **46** (1992) 3626 ; *Ann. Phys. NY.* **204** (1990) 235.
- [57] H. Choutri, M. Maamache and S. Menouar, *J. Kor. Phys. Soc,V.* **40** (2002) 358.
- [58] M. Maaamache and Y. Saâdi, *arXiv :0804.4082v1[quant-ph]* (2008).
- [59] D. Blokhintsev, *Principes de mécanique quantique*, (Editions Mir, 1981).
- [60] K. Haung, *Statistical Mechanics*, (John Wiley et sons, Singapore, 1987).
- [61] C. NGô et H. NGô, *Physique statistique à l'équilibre et hors d'équilibre*, (Masson, Paris, 1995).
- [62] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Physique statistique, 1ère partie*, (Éditions Mir, Moscou 1984).
- [63] T. Dent and M. Fairbairn, *Nuclear Physics. B* **653** (2003) 256.
- [64] M. Robnik and G. V. Romanovski, *J. Phys. A : Math. Gen.* **36** (2003) 7923.
- [65] F. Schwabl, *Quantum Mechanics*, (Springer, Berlin,2007).
- [66] R. Loudon, *Am. J. Phys.* **27** (1959) 649.
- [67] M. Andrews, *Am. J. Phys.* **44** (1976) 1064.
- [68] W. Fisher, H. Leshke and P. Müller, *J. Math. Phys.* **36** (1995) 2313.
- [69] Q-S. Lie and J. Lu, *J. Chem. Phys. Lett.* **336** (2001)118.
- [70] G. Palma and U. Raff, *Can. J. Phys.* **84** (2006) 787.
- [71] K. R. Colegarve and S. M. Abdalla, *Opt. Acta* **28** (1981) 495.
- [72] S. Mandal, *Phys. Lett. A* **321** (2004) 308.
- [73] G. E. Kalnins and Jr. W. Miller, *J. Math. Phys.* **28** (1987)1005.

- [74] F. Calogero, *J. Math. Phys.***10** (1969) 2191; *J. Math. Phys.***12** (1971) 419.
- [75] E. Pinney, *Proc. Am. Math. Soc.* **1** (1950) 681.
- [76] R. C. Hagen, *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990) 503.
- [77] Yves.Gouvernour, *Phase de Berry et quantification de Skyrmions*
(Université Laval 1998).
- [78] Nam. Anh. Nguyen, Thèse de Ph.D (Université de Laval 2001).

Résumé

Dans ce travail, nous avons présenté l'équation de Schrödinger dépendante du temps comme un outil mathématique puissant pour décrire l'évolution dans le temps des systèmes physiques quantiques. Nous avons montré que la théorie des invariants, outre sa souplesse, représente une méthode simple et globale permettant la résolution exacte de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Par l'application de la théorie des invariants, Nous avons étudié pour la première fois le potentiel coulombien dépendant du temps. Cet exemple nous a conduit à des résultats très intéressants concernant l'atome d'hydrogène, les atomes hydrogénoïdes et le potentiel coulombien à une dimension dans le cas où la masse et la charge sont des fonctions dépendantes du temps.

Enfin, Nous avons obtenue la solution exacte de l'équation de Schrödinger qui régit l'évolution temporelle d'un système physique décrit par un hamiltonien comprenant un oscillateur singulier plus un terme symétrique $(1/x)^p + p(1/x)$.

Abstract :

In this work, we presented the time-dependent Schrödinger equation as a powerful mathematical tool to describe the evolution over time of quantum physical systems. We have shown that the theory of invariants, in addition to its flexibility, is a simple and comprehensive method leading to exact resolution of the time-dependent Schrödinger equation.

By applying the theory of invariants, we have studied for the first time the time dependent Coulomb potential. This example has led us to very interesting results on the hydrogen atom, hydrogenoid atoms and time-dependent one dimensional Coulomb potential in the case where the mass and charge are time-dependent functions.

Finally, we obtained the exact solution of the Schrödinger equation which governed the temporal evolution of a physical system described by a hamiltonian including a singular oscillator plus a symmetrical $(1/x)^p + p(1/x)$ term.