

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



UNIVERSITE DE SETIF
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



N° d'ordre :

Série :

THESE

présentée pour obtenir le diplôme de

Doctorat LMD

Spécialité : Physique

Option : Physique Théorique

par

Lamri Sarra

THEME

Etude des systèmes périodiques :
 \mathcal{PT} -symétriques et pseudo- \mathcal{PT} -symétriques

Soutenue le : 29/09/2018

Devant le Jury :

Président :	K.Bencheikh	Prof.	UFA. Setif 1
Rapporteur :	M.Maamache	Prof.	UFA. Setif 1
Examineurs :	N.Mebarki	Prof.	Univ.Constantine
	A.Bounames	Prof.	Univ. Jijel
	K.Berkane	MCA.	UFA.Setif 1

Table des matières

Introduction	7
1 Rappel de la Mécanique Quantique	9
1.0.1 Physique classique et physique quantique : comparaison et enjeux	10
1.0.2 Première approche de la physique quantique	12
1.1 Mathématiques de la mécanique quantique	13
1.1.1 Probabilité; Fonction d'onde; équation de Schrödinger	14
1.1.2 Outils mathématiques de la mécanique quantique	16
1.2 Postulats de la mécanique quantique	21
1.2.1 Les postulats de la mécanique quantique	21
1.2.2 Et le principe de Heisenberg?	28
1.3 Application : Oscillateur harmonique dans un potentiel linéaire	28
2 Les symétries en Physique	30
2.1 Symétries en mécanique quantique	30
2.1.1 Conséquences de la symétrie en mécanique quantique	31
2.1.2 Propriétés générales des transformations de symétrie	32
2.1.3 Opération de symétrie	32
2.2 Les symétries fondamentales	33
2.2.1 Symétrie spatiale continue : translations et rotations	34
2.2.2 Symétries discrètes	40

3	Systèmes quantiques dépendants du temps	51
3.1	Régimes soudain et adiabatique	52
3.1.1	Approximation soudaine	52
3.1.2	Approximation adiabatique	53
3.2	Généralisation à la théorie des invariants	56
3.2.1	Théorie quantique des invariants	56
3.2.2	Application : Oscillateur Harmonique dans un champ linéaire dépendant du temps	58
3.3	Evolutions périodiques et théorie de Floquet	59
3.3.1	La méthode de Floquet :	59
3.3.2	Application : Oscillateur Harmonique dans un champ linéaire périodique dépendant du temps	60
4	\mathcal{PT} symétrie et pseudo-Hermécticité	65
4.1	\mathcal{PT} -symétrie	66
4.1.1	Valeurs propres des Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques	67
4.1.2	\mathcal{PT} - produit scalaire	68
4.1.3	L'opérateur \mathcal{C} et le \mathcal{CPT} produit scalaire	70
4.1.4	Applications	72
4.2	Pseudo-Hermécticité	75
4.2.1	Le pseudo produit scalaire	78
4.2.2	Hamiltoniens pseudo-Hermitiques ayant une base bi-orthonormée complète	78
4.2.3	Application :	79
5	Les systèmes non Hermitiques dépendants du temps	83
5.1	Hamiltonien pseudo-Hermitique	83
5.1.1	Point de vue d'Ali Mostafazadeh	84
5.1.2	Point de vue de Milozlav Znojil	85
5.1.3	Point de vue de Fring et Moussa	87
5.2	Hamiltonien pseudo \mathcal{PT} -symétrique	88

5.2.1	La théorie de Floquet pour les systèmes pseudo \mathcal{PT} -symétrique	89
5.3	Oscillateur harmonique dans un champ linéaire imaginaire périodique	92
	Conclusion	100
	Bibliographie	101
	Annexe : Article publiée	107
	Résumé	107

Remerciements

J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur le Professeur **Maamache Mustapha**, directeur de ma thèse, qui pour moi fut un directeur de thèse attentif et disponible malgré ses nombreuses charges. Sa rigueur scientifique, sa compétence et ses conseils m'ont été d'un grand apport tout au long de ce travail, qu'il soit aussi remercié.

J'exprime tous mes remerciements à l'ensemble des membres du jury :

Monsieur **Bencheikh Kamel**, professeur à l'université de Sétif, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury.

Monsieurs **Bounames Abdelhafid**, **Mebarki Nouredine**, Madame **Berkane Karima** qui ont accepté d'examiner ce travail et de faire partie du jury.

Mes plus vifs remerciements sont aussi transmis à Mesieurs **Bouguerra Yacine** et **Lakehal Halim** pour leurs conseils durant ce travail.

J'adresse mes sincères remerciements à tous les professeurs, et toutes les personnes qui par leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé mes réflexions et ont accepté à me rencontrer et répondre à mes questions durant mes études.

DEDICACES

Je dédie cette thèse à :

Mes parents : ma mère et mon père.

Mes sœurs et mon frère.

Mes amies.

A tous ceux que je ne nomme pas, mais qui se reconnaîtront.

SARAH

Introduction

La mécanique quantique est une théorie qui va profondément à l'encontre de notre intuition classique. Si bien qu'il est difficile de faire émerger des concepts non mathématisés qui correspondent à la manière dont cette théorie quantique décrit les objets physiques. C'est pourquoi on va voir aujourd'hui les bases (mathématiques donc) du formalisme de la mécanique quantique, afin de vous montrer les outils qui permettent de construire la mécanique quantique, et ainsi de vous donner les moyens de voir autrement les concepts dont on entend souvent parler, à savoir la non-localité, le probabilisme, la dualité onde-corpuscule, la quantification. Nous vous rappellerons juste les grandes idées de ce sur quoi repose vraiment la mécanique quantique.

Rappelons juste que la théorie quantique est une théorie – un modèle donc – qui permet de décrire le comportement de la matière aux très petites échelles. Cette théorie n'a pour l'heure jamais été mise en défaut. Ce n'est pas pour autant qu'il s'agit de la « vraie » théorie, permettant de décrire la nature mieux que les autres. Il s'agit d'un modèle incroyablement efficace, mais totalement inutile pour décrire par exemple la mécanique d'objets de notre taille. La mécanique newtonienne suffit dans ce cas, c'est pour ça qu'on se permet très souvent de modéliser une particule comme un point matériel. Parce que ça suffit. Il n'y a pas une meilleure manière absolue de décrire les choses. Tout dépend du domaine d'application.

Le formalisme de la mécanique quantique est très complexe et souvent il est impossible de trouver une solution analytique à la dynamique des particules. Si la situation est indépendante du temps, il y a une solution formelle. Par contre, lorsque le système quantique dépend du temps, il n'y a que quelques cas qui peuvent être solutionnés analytiquement. Pour résoudre de tels systèmes, il faut utiliser des approximations telle que l'approximation soudaine, l'approximation adiabatique ou la théorie des invariants qui est une théorie exacte mais formelle.

Nous introduirons les concepts mathématiques et ensuite expliquer à quoi ça sert, puis nous vous exposerons les principes de base et leurs implications. Rappelons juste comme il est fait assez souvent qu'on ne discutera pas ici des implications philosophiques de ces différents principes (globalement c'est ce qu'on appelle l'approche de l'École de Copenhague – du nom de la ville où travaillait Niels Bohr à l'époque de l'établissement de ces principes). Dans toute la suite, on appellera « système quantique » un objet microscopique soumis aux lois de la mécanique quantique (typiquement un électron).

Un des axiomes principaux de la mécanique quantique impose aux observables physiques d'être Hermitiques. Cela principalement dans le but de leur assurer des valeurs propres réelles. Mais en 1998, une large classe d'Hamiltoniens s'est révélée posséder des valeurs propres réelles en étant non Hermitiques. Ces Hamiltoniens respectent une condition plus faible pour l'obtention de valeurs propres réelles : la symétrie parité temps (\mathcal{PT}).

Nous nous sommes fixés comme objectif l'étude des systèmes périodique \mathcal{PT} -symétrique et pseudo- \mathcal{PT} -symétrique dépendant du temps à l'aide de la théorie de Floquet.

Le premier chapitre introduit un rappel général sur de la mécanique quantique Hermitique : les outils mathématiques nécessaires et les postulats.

On rappelle les symétries en physique dans le deuxième chapitre et en particulier la symétrie d'espace et du temps (la parité, le renversement du temps).

Le chapitre trois est dédié aux systèmes quantique Hermitique dépendante du temps, plusieurs méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger associée seront abordées.

Le quatrième chapitre introduit brièvement la mécanique quantique des Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques et pseudo Hermitiques.

Le travail original de cette thèse est décrit au cinquième chapitre dans lequel des systèmes \mathcal{PT} -symétriques et pseudo- \mathcal{PT} -symétriques dépendant du temps sont détaillés. L'oscillateur harmonique interagissant avec un champ périodique imaginaire est étudié comme exemple illustratif.

Une conclusion couronne ce travail.

Chapitre 1

Rappel de la Mécanique Quantique

La naissance de la physique quantique date du dernier siècle et cette description des phénomènes physiques, qui a transformé notre vision du monde, n'est toujours pas remise en cause, ce qui est exceptionnel pour une théorie scientifique. Ses prédictions ont toujours été vérifiées par l'expérience avec une précision impressionnante. Les concepts fondamentaux, comme les amplitudes de probabilité, les superpositions linéaires d'états, qui semblent si étranges pour notre intuition quand on les rencontre pour la première fois, restent toujours essentiels. Une évolution importante s'est toutefois manifestée au cours des dernières décennies. On assiste également à une invasion de notre monde quotidien par les concepts de la mécanique quantique non-Hermitique dont la particularité est que les valeurs propres des Hamiltoniens en jeu sont réelles exactement que le cas Hermitique. Il est donc clair qu'un enseignement moderne de la physique quantique doit tenir compte de ces développements, pour donner à l'étudiant ou au chercheur qui désire s'instruire une image plus précise des progrès réalisés et pour accroître sa motivation de mieux comprendre les phénomènes physiques dont l'importance conceptuelle et pratique est de plus en plus évidente. Le premier objectif de ce chapitre introductif, avant d'aborder le cœur de cette thèse à savoir la mécanique quantique non-Hermitique, est de donner succinctement quelques notions de base sur les concepts et les outils mathématiques de mécanique quantique Hermitique ; il s'agira d'un survol, et la grande majorité des énoncés seront donnés sans démonstration et sans discussion détaillée.

Cette introduction survole les concepts nécessaires de base de la mécanique quantique Hermitique. A cet effet, on aborde les outils mathématiques et les postulats de la mécanique

quantique afin de voir leurs changements dans le cas non-Hermitique.

1.0.1 Physique classique et physique quantique : comparaison et enjeux

Panorama de la physique classique :

Cette partie est largement inspirée de l'excellent ouvrage de Michel Le Bellac [1]. Avant d'introduire la physique quantique, résumons brièvement les fondements de la physique classique. La physique classique comporte trois branches principales, qui ont chacune diverses ramifications.

1. La première branche est la mécanique, dont la loi fondamentale est la loi de Newton, ou loi fondamentale de la dynamique, donnant la force \vec{F} sur une particule ponctuelle de masse m en fonction de la dérivée par rapport au temps de son impulsion \vec{p}

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F}. \quad (1.1)$$

Sous cette forme, l'équation fondamentale de la dynamique survit aux modifications apportées par Einstein en 1905 avec la relativité restreinte, à condition d'utiliser l'expression relativiste de l'impulsion en fonction de la vitesse \vec{v} , de la masse m de la particule et de la vitesse de la lumière c

$$\vec{p} = \frac{m\vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (1.2)$$

2. La deuxième branche est l'électromagnétisme, résumé dans les quatre équations de Maxwell donnant le champ électrique \vec{E} et le champ magnétique \vec{B} en fonction des densités de charge ρ_{em} et de courant \vec{j}_{em} , appelées sources du champ électromagnétique

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho_{em}}{\varepsilon_0}, \quad \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad \operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \vec{j}_{em} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (1.4)$$

De ces équations, on déduit la propagation d'ondes électromagnétiques dans le vide à la vitesse de la lumière

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2\right) \begin{cases} \vec{E} \\ \vec{B} \end{cases} = 0 \quad (1.5)$$

Ceci fait le lien avec l'optique, qui devient un cas particulier de l'électromagnétisme. Le lien entre 1 et 2 est fourni par la loi de Lorentz donnant la force sur une particule de charge q et de vitesse \vec{v}

$$\vec{F} = q \left(\vec{E} + (\vec{v} \times \vec{B}) \right) \quad (1.6)$$

3. La troisième branche est la thermodynamique : Attention, la loi fondamentale n'est pas le premier principe (conséquence des lois de la mécanique), mais le deuxième. Son origine microscopique a été comprise à la fin du 19e siècle et se ramène à un postulat sur la probabilité pour le système d'avoir une énergie E à une température T donnée, qui est proportionnelle au poids de Boltzmann :

$$\rho_B(E) = \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)$$

où k_B est une constante universelle : $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$ (la constante de Boltzmann). Cette physique statistique repose sur l'hypothèse atomiste, une forme très primitive de division de la matière en « quanta ». En fait, la théorie statistique n'est pas cohérente tant qu'on n'utilise que la mécanique et l'électromagnétisme classique (en particulier pour interpréter les lois de la thermodynamique du rayonnement) et ne devient cohérente que quand on y inclut la mécanique quantique.

4. En toute rigueur il faut ajouter une quatrième branche à la physique classique. En effet, la théorie relativiste de la gravitation n'est pas incluse dans le cadre précédent : cette théorie est la relativité générale, qui est une description géométrique, où les forces de gravitation sont reliées à la courbure de l'espace-temps.

Nous avons décrit dans les équations classiques précédentes les lois fondamentales de la physique classique, qui se résument donc à sept équations en tout et pour tout ! On pourra se demander ce que sont devenues les multiples autres lois qu'on a rencontrées : loi d'Ohm, loi de Hooke, lois de la dynamique des fluides, loi de Coulomb du frottement, conservation de l'énergie, de la masse, de la charge, etc. Tout d'abord, une partie de ces lois est conséquence des précédentes après traitement mathématique adéquat.

D'autres lois sont des lois phénoménologiques (équations d'état), qui n'ont pas une validité universelle, contrairement aux lois fondamentales. En fait, il existe de bons modèles microscopiques (gaz réels, viscosité, etc), mais l'existence des molécules, le calcul des forces entre molécules à partir des lois de l'électromagnétisme pour les électrons et les noyaux, etc, ne peuvent pas être faits en Mécanique classique.

Bien que la physique classique soit d'une utilité indiscutable, elle n'en présente pas moins une lacune de taille : alors que la physique se veut une théorie de la matière, la physique classique est complètement incapable d'expliquer le comportement de la matière étant donné ses constituants et les forces entre ces constituants.

1.0.2 Première approche de la physique quantique

Dualité onde–corpuscule

la mécanique quantique est une théorie très ambitieuse : prédire (ou au moins expliquer) tous les comportements de la matière à partir de ses constituants élémentaires (et par la même occasion chercher ce que sont ces constituants). En fait, l'ambition moindre de ce chapitre consiste, en partant des noyaux et des électrons, à trouver des équations qui permettent, au moins dans le principe, des prédictions sur tout le monde qui nous entoure (au niveau terrestre). Ces équations permettent en fait avec quelques adaptations de décrire aussi la matière nucléaire, ce qui permet d'arriver aux étoiles et donc à tout le système solaire. En fait, il faut aussi adapter la théorie de Maxwell du champ e.m. à la théorie quantique (ou l'inverse), afin de décrire la lumière émise par les atomes. Il se trouve qu'à petite échelle, le monde n'est pas comme le nôtre. Les particules doivent être décrites par des ondes et non des points matériels. Toutefois, la description par des trajectoires est valable à titre d'approximation quand la longueur d'onde devient très petite devant les dimensions spatiales de ce qu'on cherche à mesurer. C'est la même chose pour la description du champ e.m. en terme de rayons (optique géométrique) : valable si $\lambda \ll d$ où d est la dimension des objets qui se trouvent sur le trajet du faisceau. Compte tenu de ce que l'impulsion et le vecteur d'onde sont parallèles et de même sens, on aboutit à la relation vectorielle suivante entre impulsion \vec{p} et vecteur d'onde \vec{k}

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (1.7)$$

Cette équation se traduit aussi par une relation (cette fois scalaire) entre l'impulsion et la longueur d'onde λ , la longueur d'onde de de Broglie

$$p = \frac{h}{\lambda}.$$

L'hypothèse de Broglie est que ces deux dernières relations sont valables pour toutes les particules. Selon cette hypothèse, une particule d'impulsion \vec{p} possède des propriétés ondulatoires caractéristiques d'une longueur d'onde $\lambda = h/p$. Si $\vec{v} \ll c$, on utilisera $\vec{p} = m \vec{v}$, et sinon la formule générale relativiste décrite plus haut, sauf bien sûr pour $m = 0$, où $p = E/c$. Si cette hypothèse est correcte, on doit pouvoir observer avec des particules des propriétés caractéristiques des ondes comme les interférences et la diffraction. C'est ce qu'on appelle la dualité onde-corpuscule.

1.1 Mathématiques de la mécanique quantique

Le principe de superposition est un principe fondateur de la mécanique quantique, et nous pouvons s'appuyer sur ce principe pour rendre compte des interférences. La mécanique quantique étant une théorie linéaire et il est naturel que les espaces vectoriels y jouent un rôle fondamental, ainsi le principe de superposition en est un principe fondateur. Nous verrons qu'un état physique est représenté mathématiquement par un vecteur dans un espace dont nous allons préciser les caractéristiques, et qui sera appelé espace des états. Un second principe fondateur, également déduit des expériences d'interférences, est l'existence d'amplitudes de probabilité. Ces amplitudes de probabilité seront représentées mathématiquement par des produits scalaires définis sur l'espace des états. En mécanique quantique les amplitudes de probabilité sont fondamentalement des nombres complexes : le produit scalaire sera a priori un nombre complexe. Les propriétés physiques : impulsion, position, énergie . . . seront représentées par des opérateurs agissant dans l'espace des états. Avant, d'introduire les propriétés essentielles des espaces de Hilbert, c'est-à-dire les espaces vectoriels munis d'un produit scalaire défini positif, en nous limitant au cas de la dimension finie, nous survolerons les notions de Probabilité ; Fonction d'onde et équation de Schrödinger.

1.1.1 Probabilité; Fonction d'onde; équation de Schrödinger

Description probabiliste et densité de probabilité

En fait, toute la physique est une description probabiliste : un résultat de mesure est donné par un nombre et son incertitude, et on peut même dire que l'on peut souvent donner une loi de probabilité de trouver telle valeur de la mesure (on fait plusieurs fois la même expérience et on fait un histogramme).

Pour fixer les idées, nous rappelons la définition de la densité de probabilité $p(\vec{r})$. La probabilité $dP(\vec{r})$ de trouver la particule dans un petit volume $d\vec{r}$ est $dP(\vec{r}) = p(\vec{r})d\vec{r}$. Cela n'est pas limité à la mesure de la position, mais peut-être étendu à la mesure de toute variable continue, par exemple la vitesse, ou une seule coordonnée x .

Dans le domaine classique, on pourrait écrire alors l'évolution de ces densités de probabilités au cours du temps (en supposant qu'on les connaît au temps $t = 0$ et en résolvant les équations de Newton). Il se trouve que cette méthode ne donne pas les bons résultats dès qu'on arrive dans le domaine microscopique (c.-à-d. quand la longueur d'onde de de Broglie λ est de l'ordre de grandeur des distances de variation de cette probabilité). On doit alors avoir recours à une autre description.

Fonction d'onde

Pour bien décrire la physique d'une particule à des échelles de longueur de l'ordre de la longueur d'onde de Broglie λ , il fallait introduire une nouvelle fonction de la position, appelée fonction d'onde, notée en général $\psi(\vec{r})$ dont les valeurs sont complexes et qui a la propriété que $|\psi(\vec{r})|^2 = p(\vec{r})$, la densité de probabilité. En clair, on complète la description par $p(\vec{r})$ en ajoutant une phase $\psi(\vec{r}) = \sqrt{p(\vec{r})} \exp(i\varphi(\vec{r}))$.

Équation de Schrödinger

Nous passons très vite et invitons le lecteur à voir le premier chapitre de [2] pour plus de détails.

Équation de Schrödinger dépendant du temps

Cette équation décrit comment la fonction d'onde se transforme au cours du temps. Pour l'instant elle va vous paraître compliquée, mais sa forme se rationalisera quand on sera un peu plus loin et qu'on aura vu le Hamiltonien. On a donc une fonction $\psi(\vec{r})$ pour chaque valeur du temps t . On définit donc une fonction $\psi(\vec{r}, t)$. Attention, cette fonction n'est en aucun cas reliée à une densité de probabilité de mesure d'un temps : $|\psi(\vec{r}, t)|^2 dt$ (noter l'élément différentiel dt) n'a aucune signification physique ! t est ici un paramètre et non un résultat de mesure. L'équation s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\Delta} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.8)$$

où $\hbar = h/2\pi$, $\vec{\Delta}$ est le laplacien et $V(\vec{r})$ est l'énergie potentielle de la particule (qui pourrait dépendre aussi du temps d'ailleurs).

Principe de superposition

On peut faire une constatation très importante en regardant l'équation de Schrödinger, c'est qu'elle est linéaire. Cette constatation anodine est à la base de méthodes puissantes de résolution de l'équation. D'abord qu'est-ce que ça veut dire linéaire ? Que si $\Psi_1(\vec{r}, t)$ et $\Psi_2(\vec{r}, t)$ sont deux solutions de l'équation (1.8), alors $\alpha_1 \Psi_1(\vec{r}, t) + \alpha_2 \Psi_2(\vec{r}, t)$ est aussi solution de l'équation (α_1 et α_2 peuvent être deux constantes complexes quelconques). C'est ce que l'on appelle le principe de superposition. Ceci permet d'essayer d'écrire la solution générale sous la forme d'une combinaison linéaire de solutions ayant certaines propriétés qui simplifient l'équation. En particulier, on peut éliminer le temps de l'équation, et obtenir l'équation de Schrödinger indépendante du temps (ou stationnaire) qui fait intervenir l'énergie E de la particule :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\Delta} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t). \quad (1.9)$$

Il se trouve que, dans beaucoup de cas, cette équation n'a de solution physiquement acceptable (c.-à-d. normalisable) que pour un ensemble discret de valeurs de E . Toutes les valeurs de E ne sont pas nécessairement autorisées : c'est la quantification de l'énergie.

1.1.2 Outils mathématiques de la mécanique quantique

Les notions telle que : dualité onde-corpuscule, fonction d'onde, probabilité de présence d'une particule, incertitudes sur la mesure des grandeurs physiques et la quantification des grandeurs physiques (l'énergie) ; montrent l'importance jouée par "la fonction d'onde" en physique quantique et il est donc nécessaire d'étudier les **propriétés mathématiques** de l'espace des fonctions d'ondes et des opérateurs agissant sur ces fonctions à l'intérieur de cet espace. Dans cette partie, nous introduisons les propriétés essentielles des espaces de Hilbert, c'est-à-dire les espaces vectoriels munis d'un produit scalaire défini positif, en nous limitant au cas de la dimension finie.

Il est impossible de présenter ici un formalisme complet et rigoureux, mais donner des divers notions utiles en mécanique quantique telles que la notion de représentation, notion de Dirac, et l'algèbre des opérateurs [2, 3, 4, 5, 6, 7].

Espace des états et notations de Dirac

Espace des états On considère un système physique dont l'ensemble des configurations \mathcal{C} [10] est décrit par des variables q_i ($i = 1 \dots N$). La fonction d'onde est une fonction $\Psi(q)$ qui associe une valeur complexe à chaque configuration (on représente une configuration par la notation q , qui représente en fait l'ensemble des variables q_i). La fonction d'onde a la propriété que le carré de son module est la densité de probabilité que le système soit dans la configuration q . En notant dq un élément de volume dans l'espace de configuration (il est en général de la forme $dq = A(q) \prod_i dq_i$), la densité de probabilité est donc $|\Psi(q)|^2 dq$. Ainsi, on doit avoir :

$$\int_{\mathcal{C}} |\Psi(q)|^2 dq = 1.$$

Mathématiquement, on dit que la fonction $\Psi(q)$ est de carré sommable. L'ensemble des fonctions de carré sommable sur \mathcal{C} est un espace vectoriel noté $L^2(\mathcal{C})$ en mathématiques. C'est un espace de dimension infinie. Sa structure est celle d'un espace de Hilbert \mathcal{H} . En fait, l'ensemble des fonctions de carré sommable est trop grand. Il contient en particulier des fonctions discontinues, ce qui n'a aucun sens physiquement. On peut donc se restreindre à des fonctions continues, voire dérivables, voire indéfiniment dérivable, voire analytiques. Nous dirons donc juste que l'espace des fonctions d'onde de notre système est un sous-espace de l'espace de Hilbert $L^2(\mathcal{C})$, que nous appellerons espace des fonctions d'onde et que nous noterons \mathcal{F} . Comme vu précédemment,

il est possible de représenter notre fonction d'onde dans différentes bases, si bien que notre fonction d'onde aura diverses représentations possibles, la forme $\Psi(q)$ n'étant qu'une forme de représentation parmi plein d'autres. On est donc conduit à envisager un espace abstrait (notons le \mathcal{E}), sous-espace d'un espace de Hilbert abstrait, dans lequel notre particule sera caractérisée par un vecteur d'état, dont une des représentations possibles sera d'être une fonction sur l'espace de configuration \mathcal{C} , ce qui fait que l'espace \mathcal{E} est isomorphe à l'espace \mathcal{F} . L'avantage de procéder ainsi est que tout ce que nous dirons par la suite est applicable à n'importe quel espace abstrait, même si le vecteur d'état ne peut pas être représenté par une fonction, par exemple si l'espace \mathcal{E} est de dimension finie. Il se trouve que des vecteurs d'états dans des espaces de dimension finie peuvent exister en mécanique quantique, et sont même nécessaires pour expliquer des propriétés comme le spin (moment cinétique intrinsèque) des particules.

Notations de Dirac

Les notations de Dirac sont une manière de représenter les vecteurs de l'espace \mathcal{H} , les formes linéaires sur cet espace, ainsi que le produit scalaire.

Ket : On désignera par $|\psi\rangle$ un vecteur de notre espace abstrait (on utilise la même lettre pour se souvenir qu'il a comme représentant $\psi(q)$ dans \mathcal{F}). On appelle ce vecteur ket. Les combinaisons linéaires de kets sont aussi des kets. On note : $\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle = |\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2\rangle$ la combinaison linéaire de deux kets.

Bra : Un bra est une fonction linéaire de l'espace \mathcal{H} à valeurs dans \mathcal{C} , ce qu'on appelle aussi une forme linéaire. On la note $\langle|$, par exemple $\langle\chi|$. Pour l'instant l'image d'un ket

$|\psi\rangle$ par le bra $\langle\chi|$ est notée $\langle\chi|(|\psi\rangle) \equiv \langle\chi|\psi\rangle$. La linéarité signifie que :

$$\langle\chi|(\alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle) = \alpha_1 \langle\chi|\psi_1\rangle + \alpha_2 \langle\chi|\psi_2\rangle. \quad (1.10)$$

On peut bien sûr faire des combinaisons linéaires de bras de type

$$(\alpha_1 \langle\chi_1| + \alpha_2 \langle\chi_2|)|\psi\rangle = \alpha_1 \langle\chi_1|\psi\rangle + \alpha_2 \langle\chi_2|\psi\rangle, \quad (1.11)$$

pour tout ket $|\psi\rangle$ de l'espace \mathcal{E} . L'ensemble des formes linéaires (des bras) sur l'espace \mathcal{E} est appelé l'espace dual de \mathcal{E} et est noté \mathcal{E}^* . Quand \mathcal{E} est de dimension finie, \mathcal{E}^* est de même dimension, et on peut donc trouver un isomorphisme entre ces deux espaces. Ce n'est pas

nécessairement le cas en dimension infinie. L'espace \mathcal{E} est muni d'un produit scalaire défini positif, ce qui est en fait un espace de Hilbert.

Produit scalaire, norme : Le produit scalaire de deux vecteurs $|\chi\rangle$ et $|\psi\rangle$ est noté $\langle\chi|\psi\rangle$. Il est linéaire par rapport à $|\psi\rangle$, c'est à dire que $\langle\chi|(\alpha_1|\psi_1\rangle + \alpha_2|\psi_2\rangle) = \alpha_1\langle\chi|\psi_1\rangle + \alpha_2\langle\chi|\psi_2\rangle$ et vérifie la propriété de conjugaison complexe

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^*, \quad (1.12)$$

ce qui implique que $\langle\psi|\psi\rangle$ est un nombre réel. Il est anti-linéaire par rapport à $|\chi\rangle$, c'est à dire que $(\alpha_1\langle\chi_1| + \alpha_2\langle\chi_2|)|\psi\rangle = \alpha_1^*\langle\chi_1|\psi\rangle + \alpha_2^*\langle\chi_2|\psi\rangle$. Enfin, le produit scalaire est défini positif : $\langle\chi|\psi\rangle \geq 0$, $\langle\psi|\psi\rangle = 0 \iff |\psi\rangle = 0$.

Il sera commode de choisir dans \mathcal{E} une base orthonormée de N vecteurs $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, |N\rangle\}$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}. \quad (1.13)$$

Tout vecteur $|\psi\rangle$ peut se décomposer sur cette base avec des coefficients c_n qui sont les composantes de $|\psi\rangle$ dans cette base

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |n\rangle. \quad (1.14)$$

Prenant le produit scalaire de cette dernière équation avec le vecteur de base $|m\rangle$, on trouve pour c_m

$$c_m = \langle m|\psi\rangle. \quad (1.15)$$

Si un vecteur $|\chi\rangle$ se décompose sur cette même base suivant $|\chi\rangle = \sum d_n |n\rangle$, alors le produit scalaire $\langle\chi|\psi\rangle$ s'écrit,

$$\langle\chi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N d_n^* c_n. \quad (1.16)$$

La norme de $|\psi\rangle$, notée $\|\psi\|$, est définie à partir du produit scalaire

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 \geq 0. \quad (1.17)$$

Une propriété importante du produit scalaire est l'inégalité de Schwarz

$$|\langle \chi | \psi \rangle|^2 \leq \langle \chi | \chi \rangle \langle \psi | \psi \rangle = \|\chi\|^2 \|\psi\|^2. \quad (1.18)$$

L'égalité est vraie si et seulement si $|\psi\rangle$ et $|\chi\rangle$ sont proportionnels : $|\chi\rangle = \lambda |\psi\rangle$.

Opérateurs linéaires sur \mathcal{E}

Opérateurs linéaires, Hermitiques, unitaires Un opérateur linéaire A fait correspondre au vecteur $|\psi\rangle$ un vecteur $|A\psi\rangle$ vérifiant la propriété de linéarité

$$|A(\alpha\psi + \lambda\chi)\rangle = \alpha |A\psi\rangle + \lambda |A\chi\rangle. \quad (1.19)$$

Dans une base déterminée, cet opérateur est représenté par une matrice d'éléments A_{mn} . En effet grâce à la linéarité et en utilisant la décomposition

$$|A\psi\rangle = \sum_{n=1}^N c_n |An\rangle, \quad (1.20)$$

on obtient les composantes d_m de $|A\psi\rangle = \sum_m d_m |m\rangle$

$$d_m = \langle m | A\psi \rangle = \sum_{n=1}^N c_n \langle m | An \rangle = \sum_{n=1}^N c_n A_{mn}. \quad (1.21)$$

L'élément de matrice A_{mn} est donc

$$A_{mn} = \langle m | An \rangle.$$

L'opérateur conjugué Hermitique (ou adjoint) A^+ de A est défini par

$$\langle \chi | A\psi \rangle = \langle A\chi | \psi \rangle = \langle \psi | A\chi \rangle^*, \quad (1.22)$$

pour tout couple de vecteurs $|\psi\rangle, |\chi\rangle$. On montre facilement que A^+ est bien un opérateur linéaire. Ses éléments de matrice dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle, \dots, |N\rangle\}$ sont obtenus en prenant pour $|\psi\rangle$ et $|\chi\rangle$ les vecteurs de base et $(A^+)_{mn}$ vérifie

$$(A^+)_{mn} = A^*_{nm}. \quad (1.23)$$

Le conjugué Hermitique du produit AB de deux opérateurs est B^+A^+ ; en effet

$$\langle \chi | (AB)^+ \psi \rangle = \langle AB\chi | \psi \rangle = \langle B\chi | A^+ \psi \rangle = \langle \chi | B^+ A^+ \psi \rangle. \quad (1.24)$$

Un opérateur vérifiant $A = A^+$ est appelé Hermitique, ou auto-adjoint. Les deux termes sont équivalents pour les espaces de dimension finie, mais non dans le cas de la dimension infinie.

Un opérateur tel que $UU^+ = U^+U = I$, ou de façon équivalente $U^{-1} = U^+$, est appelé opérateur unitaire, I désigne l'opérateur identité de l'espace de Hilbert. Dans un espace de dimension finie, une condition nécessaire et suffisante pour qu'un opérateur U soit unitaire est qu'il conserve la norme

$$\|U\psi\|^2 = \|\psi\|^2 \quad \text{ou} \quad \langle U\psi | U\psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

Les opérateurs unitaires effectuent les changements de base orthonormée dans \mathcal{E} . Soit $|n'\rangle = |Un\rangle$, alors

$$\langle m' | n' \rangle = \langle Um | Un \rangle = \langle m | n \rangle = \delta_{mn} = \delta_{m'n'}$$

et l'ensemble des vecteurs $\{|n'\rangle\}$ forme une base orthonormée.

Relation de fermeture Pour une base orthonormée, on a la relation suivante pour tout ket $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1} |n\rangle \langle n | \psi \rangle, \quad (1.25)$$

le symbole $|n\rangle \langle n|$ représente ce que l'on appelle un projecteur P_n . Dans un espace vectoriel de dimension finie, il transforme un vecteur en sa projection orthogonale sur le vecteur $|n\rangle$. C'est une application linéaire (on dit un opérateur linéaire dans le cas d'un espace de dimension infinie) de \mathcal{E} dans lui-même. Ce que dit cette dernière équation c'est que la somme de tous les projecteurs sur les vecteurs de la base est l'opérateur identité. On écrit cela sous la forme :

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \sum_n P_n = I, \quad (1.26)$$

cette relation est appelée relation de fermeture. Elle est souvent très commode dans les calculs. Par exemple, elle redonne simplement la loi de multiplication des matrices.

Opérateurs unitaires et opérateurs Hermitiques Les propriétés des opérateurs unitaires $U^+ = U^{-1}$ sont intimement liées à celles des opérateurs Hermitiques, et en particulier ils peuvent toujours être diagonalisés.

Le théorème de base pour les opérateurs unitaires s'énonce comme suit.

Théorème : a. Les valeurs propres a_n d'un opérateur unitaire sont de module unité : $a_n = \exp(i\alpha_n)$, α_n réel.

b. Les vecteurs propres correspondant à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux.

c. La décomposition spectrale d'un opérateur unitaire s'écrit en fonction de projecteurs P_n sous la forme

$$U = \sum_n a_n P_n = \sum_n e^{i\alpha_n} P_n. \quad (1.27)$$

1.2 Postulats de la mécanique quantique

Nous allons énoncer dans ce chapitre les postulats de base de la physique quantique. Les postulats tels qu'ils sont énoncés dans ce chapitre fixent le cadre conceptuel général de la mécanique quantique, et ne donnent pas directement les outils nécessaires pour résoudre des problèmes spécifiques. Il est possible d'utiliser d'autres ensembles de postulats : par exemple une autre approche de la mécanique quantique consiste à énoncer des postulats sur les intégrales de chemin.

1.2.1 Les postulats de la mécanique quantique

Premier postulat I : la description de l'état quantique d'un système

Un système quantique est complètement décrit à chaque instant par un vecteur d'état normé, noté $|\text{ket}\rangle$, appartenant à un espace de Hilbert.

Cela veut dire qu'un système quantique se décrit dans un espace mathématique particulier, complexe. Il existe un vecteur de cet espace qui contient toute l'information sur le système.

Le fait qu'un état physique soit représenté par un vecteur implique sous certaines conditions le principe de superposition, caractéristique de la linéarité de la théorie : si nous avons deux vecteurs appartenant à l'espace de Hilbert, alors leur somme appartient aussi à l'espace de Hilbert (comme la somme de deux vecteurs de l'espace donne toujours un vecteur de l'espace).

Deuxième postulat II : l'observable

Toute grandeur physique mesurable \mathcal{A} est associée à un opérateur linéaire Hermitique A appelé « observable ».

Une grandeur physique correspond à une quantité que l'on peut mesurer. La position, la vitesse, l'énergie par exemple. Comme le dit le principe, chaque grandeur que l'on peut mesurer est associée à un opérateur qui agit sur le vecteur d'état (un opérateur c'est comme une fonction). On note souvent une fonction réelle $f(x)$ où x est la variable réelle du problème. La fonction associe à chaque nombre x un autre nombre $f(x)$. Ici il s'agit d'un raisonnement analogue : chaque observable transforme un vecteur d'état en un autre vecteur d'état de l'espace hilbertien (linéarité). **Chaque observable transforme un vecteur d'état en un autre vecteur d'état de l'espace hilbertien.**

En résumé et à ce stade, un système est entièrement décrit par un vecteur d'état, et à chaque grandeur physique on associe un opérateur qui agit sur le vecteur d'état.

Troisième postulat III : le résultat d'une mesure

Les résultats possibles de la mesure d'une grandeur physique \mathcal{A} sont les valeurs propres de l'observable associée.

Mais quel est la différence avec ce qui précède? En fait, ce qu'on vient de déterminer précédemment, c'est comment on associe une grandeur physique à la description d'un système. On applique au vecteur d'état un opérateur, ce qui nous donne un nouveau vecteur d'état. Mais désormais, ce principe nous donne ce qui se passe quand on fait expérimentalement la mesure de cette grandeur physique. Ce qui est dit ici, c'est qu'alors plusieurs résultats sont possibles! C'est là qu'intervient le probabilisme de la mécanique quantique.

Ces valeurs propres correspondent aux résultats possibles de la mesure physique (ce sont toujours des valeurs réelles et non pas complexes, du fait des propriétés Hermétiennes de l'observable). Et – précision cruciale – dans la mesure où il y a un nombre fini (ou plutôt dénombrable) de valeurs propres, cela signifie que les résultats de la mesure sont quantifiés. S'il y a un nombre fini de valeurs propres alors il y a un nombre fini de résultats de mesures possibles! C'est notamment le cas pour l'énergie très souvent (lorsque le système est soumis à des conditions aux

limites par exemple), si bien qu'on voit alors émerger le concept de quantification de l'énergie.

Ainsi, pour chaque grandeur physique correspondent des valeurs propres qui sont les résultats possibles de la mesure. Chaque valeur propre a une probabilité particulière d'être mesurée. C'est très puissant, parce que cela signifie que si on connaît la manière dont s'écrit l'observable, on peut grâce à une simple opération mathématique déterminer les résultats possibles de la mesure de la grandeur physique associée.

Quatrième postulat IV : la projection de mesure

Après une mesure, le système se trouve projeté dans l'état propre correspondant au résultat de la mesure.

Cela veut dire qu'à chaque valeur propre est associé ce qu'on appelle un état propre, qui correspond ici au vecteur d'état dans lequel a été « projeté » le vecteur d'état initial lors de la mesure. On peut dire qu'en quelque sorte dans la base de ces états propres (qui forment bien une base de l'espace hilbertien) on n'a gardé que la composante du vecteur d'état suivant l'état propre associé à la valeur propre mesurée. En clair, à chaque résultat possible de la mesure, le vecteur d'état après la mesure est un état bien déterminé.

Pour déterminer la probabilité avec laquelle un résultat donné va être mesuré, il faut connaître le vecteur d'état initial, le vecteur d'état projeté associé à la mesure, en faire le produit scalaire (on projette l'état initial sur l'état mesuré) et en prendre le module, c'est-à-dire le mettre au carré : $\mathcal{P}_{\text{mesurer } a} = |\langle \varphi | \psi_a \rangle|^2$, où $|\varphi\rangle$ est l'état initial et $|\psi_a\rangle$ le vecteur propre associé à la valeur propre a . On connaît ainsi la probabilité de mesurer chaque résultat possible. On peut alors calculer des probabilités de mesure à partir du vecteur d'état, et faire des vérifications expérimentales des résultats prédits par la théorie. Et ça marche redoutablement bien !

Nous voici arrivés à l'un des aspects les plus problématiques de la théorie quantique. Il nous faut maintenant expliquer ce qu'il advient du vecteur d'état quand on effectue une mesure. Ce résultat est présenté dans la plupart des manuels comme un postulat supplémentaire de la mécanique quantique, le “postulat de réduction du paquet d'ondes” (RPO), énoncé sous la forme :

Cinquième Postulat RPO V : réduction du paquet d'ondes

Si le système était initialement dans l'état $|\varphi\rangle$, et si le résultat de la mesure de \mathcal{A} est a_n , alors immédiatement après la mesure, le système se trouve dans l'état projeté sur le sous-espace de la valeur propre a_n

$$|\varphi\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \frac{P_n |\varphi\rangle}{\langle \varphi | P_n | \varphi \rangle^{1/2}}. \quad (1.28)$$

Le vecteur $|\psi\rangle$ est bien normalisé à l'unité car $\|P_n |\varphi\rangle\|^2 = \langle \varphi | P_n^+ P_n | \varphi \rangle = \langle \varphi | P_n | \varphi \rangle$ compte tenu des propriétés des projecteurs P_n . L'énoncé de ce "pseudo" postulat appelle quelques remarques. Il ne faut surtout pas imaginer que cette dernière transformation correspond à un processus physique réel. Elle n'a de sens que si l'on s'intéresse à une évolution effective, qui fait abstraction de l'appareil de mesure pour se focaliser uniquement sur le système. En fait, c'est une simple commodité d'écriture dans l'espace de Hilbert des états du système, qui isole artificiellement le système de l'appareil de mesure et de son environnement.

Jusqu'à présent, nous avons considéré le système physique à un instant donné, ou pendant l'intervalle de temps supposé infiniment court d'une mesure. Nous allons maintenant prendre en considération l'évolution temporelle du vecteur d'état, auquel nous donnerons une dépendance explicite $|\varphi(t)\rangle$ par rapport au temps t .

Sixième postulat VI : l'évolution temporelle d'un système quantique

L'évolution temporelle du système quantique est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle. \quad (1.29)$$

On a jusqu'ici décrit l'effet d'observables physiques sur un vecteur d'état, mais on s'intéresse maintenant à son évolution dans le temps. Il s'agit en fait ici d'une équation analogue au principe fondamental de la dynamique (la troisième loi de Newton), mais en beaucoup plus générale. $|\Psi(t)\rangle$ est le vecteur d'état, qui comprend toutes les informations sur le système. H est une observable qui comprend l'énergie du système. On l'appelle le Hamiltonien. Cette observable prend comme entrée le vecteur d'état. Ainsi on retrouve une relation entre la dérivée temporelle du vecteur d'état, et le vecteur d'état lui-même : il s'agit d'une équation différentielle, qui

permet de déterminer l'évolution du vecteur d'état au court du temps. Ce résultat dépend des différentes énergies présentes dans le système.

Notons que \hbar est une constante appelée la constante de Planck réduite, et que i est le nombre complexe. Il est tout à faire remarquable que cette équation, censée décrire le comportement de systèmes physiques, soit complexe. Mais comme on l'a vu, le vecteur d'état est complexe, et ce n'est qu'en repassant aux probabilités qu'on retrouve des résultats physiques, et donc réels.

Bon alors ça paraît ensuite plutôt facile, il suffit de résoudre cette équation et on peut connaître le comportement de tout système quantique! Oui sauf que non, car très souvent le Hamiltonien est très difficile à écrire ce qui rend l'équation parfois impossible à résoudre analytiquement (notamment quand il y a beaucoup de particules). Il faut alors faire des simulations numériques et/ou des approximations.

La (nécessaire) conservation de la norme du vecteur d'état est assurée par l'Hermécticité de H . En effet,

$$\frac{d}{dt} \|\Psi(t)\|^2 = \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | H - H^\dagger | \Psi(t) \rangle = 0 \quad (1.30)$$

car $H = H^\dagger$. La conservation de la norme de $|\Psi(t)\rangle$ implique, dans un espace de Hilbert de dimension finie, que l'évolution $|\Psi(0)\rangle \rightarrow |\Psi(t)\rangle$ est unitaire : on parle alors d'évolution Hamiltonienne, ou d'évolution unitaire. Nous avons donné en (1.29) l'équation d'évolution sous forme différentielle. Il existe une formulation intégrale de cette équation qui fait intervenir l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$. Dans cette formulation, le postulat VI devient :

Sixième postulat VI' : Opérateur d'évolution

Le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ au temps t se déduit du vecteur d'état $|\Psi(t_0)\rangle$ au temps t_0 par application d'un opérateur unitaire $U(t, t_0)$, appelé opérateur d'évolution

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle. \quad (1.31)$$

L'unitarité de U : $U^\dagger U = U U^\dagger = I$, assure la conservation de la norme $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle = I$. Inversement on aurait pu partir de la conservation de la norme pour montrer que $U^\dagger U = I$. L'opérateur d'évolution obéit aussi à la propriété de groupe

$$U(t, t_1)U(t_1, t_0) = U(t, t_0). \quad t_0 \leq t_1 \leq t \quad (1.32)$$

En effet, il est équivalent d'aller directement de t_0 à t , ou d'aller d'abord de t_0 à t_1 et ensuite de t_1 à t . Les postulats d'évolution temporelle IV et IV' ne sont bien sûr pas indépendants. En effet, il est facile à partir de (1.29) d'écrire une équation différentielle pour $U(t, t_0)$. En différentiant (1.31) par rapport au temps et en comparant avec (1.29), on en déduit une équation différentielle pour $U(t, t_0)$

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = -\frac{i}{\hbar}H(t)U(t, t_0). \quad (1.33)$$

Il est donc aisé de passer de la formulation intégrale (1.31) à la formulation différentielle (1.29). Le passage inverse est plus compliqué : en effet, si $H(t)$ était un nombre, l'équation (1.33) s'intégrerait immédiatement. Mais $H(t)$ est un opérateur et en général

$$U(t, t_0) \neq \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t H(t')dt'\right) \quad (1.34)$$

parce qu'il n'y a aucune raison pour que $[H(t'), H(t'')] = 0$. Cependant il existe une formule générale [3], pour calculer $U(t, t_0)$ à partir de $H(t)$, et les postulats IV et IV' sont strictement équivalents.

Naturellement, il peut parfaitement arriver que le Hamiltonien soit indépendant du temps, même pour un système non isolé. Lorsque le Hamiltonien est indépendant du temps, l'équation différentielle (1.33) s'intègre sans problème et

$$U(t, t_0) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}H(t - t_0)\right) \quad (1.35)$$

qui ne dépend que de $(t - t_0)$. L'opérateur $U(t - t_0)$ est obtenu par exponentiation de l'opérateur Hermitique H ; $U(t - t_0)$ effectue une translation de temps de $(t - t_0)$ sur le vecteur d'état, et si $(t - t_0)$ devient infinitésimal

$$U(t - t_0) \simeq I - \frac{i(t - t_0)}{\hbar}H$$

Cette équation s'interprète ainsi : H est le générateur infinitésimal des translations de temps, et, pour un système isolé, la définition la plus générale du Hamiltonien est d'être précisément ce générateur infinitésimal.

Maintenant, si l'Hamiltonien H ne dépend pas du temps, l'intégration de (1.33) (et on tenant compte la condition $U(t_0, t_0) = I$) donne

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}, \quad (1.36)$$

et

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} |\Psi(t_0)\rangle.$$

En plus, il faut aussi que l'évolution des états propres dans le temps d'un Hamiltonien doit être unitaire

$$\begin{aligned} U(t, t_0)U^\dagger(t, t_0) &= U(t, t_0)U^{-1}(t, t_0) \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} e^{\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} = I. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Cette condition garantie justement l'indépendance du probabilité par rapport au temps.

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle.$$

Lorsque l'on examine l'évolution d'un système ouvert, on rencontre automatiquement une évolution non unitaire qui peut parfois être représentée par un Hamiltonien non-Hermitique.

Par définition, un opérateur antiunitaire est un opérateur anti-linéaire inversible dont l'adjoint est égal à l'inverse :

$$T \text{ est antiunitaire} \Leftrightarrow T \text{ est antilinéaire et } T^\dagger = T^{-1}$$

Un opérateur antiunitaire a la propriété de transformer le produit scalaire en son complexe conjugué :

$$T \text{ antiunitaire} \Leftrightarrow (T|\psi\rangle, T|\phi\rangle) = (|\psi\rangle, |\phi\rangle)^*, \quad \forall |\psi\rangle, |\phi\rangle$$

On rencontrera un opérateur anti-unitaire lors de l'étude de l'invariance par renversement du temps.

1.2.2 Et le principe de Heisenberg ?

Vous savez, ce principe qui dit qu'on ne peut pas connaître avec une précision infinie à la fois la position et la vitesse d'un objet quantique ? Et bien nous n'en parlons pas, car le principe d'indétermination de Heisenberg n'est pas un principe dans ce formalisme. Il s'agit d'un résultat mathématique qui peut se démontrer, en écrivant les opérateurs position et impulsion (qui correspondent aux observables associés à la position et la vitesse des particules). On dit que ces opérateurs ne commutent pas, ils ne sont pas interchangeables dans un produit, ce qui se traduit physiquement par le fait qu'on ne peut pas les mesurer simultanément. Dans une formulation plus moderne on parle plutôt des relations de Heisenberg, $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ mais bien que facile à montrer dans le cadre du formalisme présenté ci-dessus, ce résultat est tellement étonnant pour une intuition classique comme la nôtre que c'est un résultat totalement remarquable.

Voilà, on a donné un aperçu sur les bases de la mécanique quantique. Comme vous le voyez, c'est très mathématisé et tout y est parfaitement établi à travers la notion de vecteur d'état agissant dans un espace complexe.

1.3 Application : Oscillateur harmonique dans un potentiel linéaire

Dans ce paragraphe on résout l'équation de Schrödinger stationnaire

$$h |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle, \quad (1.38)$$

d'un oscillateur harmonique dans un potentiel linéaire

$$h = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 - fx. \quad (1.39)$$

où $f = \lambda$, est un paramètre constant, E_n et $|\phi_n\rangle$ sont respectivement les valeurs et les vecteurs propres de h . Introduisons la transformation unitaire indépendante du temps

$$|\psi_n\rangle = V^{-1} |\tilde{\psi}_n\rangle, \quad (1.40)$$

telle que

$$V = \exp\left(i \frac{\lambda}{\hbar m \omega_0^2} p\right), \quad (1.41)$$

dont l'action sur les opérateurs x et p est comme suit

$$VxV^{-1} = x + \frac{\lambda}{m\omega_0^2}, \quad VpV^{-1} = p. \quad (1.42)$$

Ainsi le nouveau hamiltonien h' qui régit le nouveau état $|\tilde{\psi}_n\rangle$ est celui d'un oscillateur harmonique

$$h \longmapsto h' = VhV^{-1} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 + \frac{\lambda^2}{2m\omega_0^2} \quad (1.43)$$

dont les valeurs propres et les fonctions d'ondes propres sont respectivement

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda^2}{2m\omega_0^2}, \quad (1.44)$$

$$\tilde{\psi}_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[- \left(\frac{m\omega_0 x^2}{2} \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x \right) \right], \quad (1.45)$$

De l'équation (1.40), on déduit la solution $\psi_n(x)$ de notre problème initial (1.38)

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[- \left(\frac{m\omega_0 x^2}{2\hbar} \right) H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} \left(x - \frac{\lambda p}{m\omega_0^2} \right) \right) \right]. \quad (1.46)$$

H_n étant les polynômes d'Hermite.

Chapitre 2

Les symétries en Physique

2.1 Symétries en mécanique quantique

Les symétries jouent un rôle extrêmement important en physique théorique. Non seulement facilitent-elles beaucoup la solution de nombreux problèmes, mais elles sont aussi à la base des théories des interactions fondamentales.

En physique on appelle symétries les transformations qui laissent invariant un objet (sens géométrique du terme), mais aussi une loi (équation de Newton par renversement du temps si la force ne dépend que de la position, par exemple) ou un observable en mécanique quantique (opérateur Hamiltonien, par exemple). Les symétries forment ce que les mathématiciens appellent des groupes. C'est pour cela que l'étude des symétries en physique est souvent appelée théorie des groupes. Il y a deux grandes classes de symétries : les transformations continues (rotation d'une sphère, par exemple) et les transformations discrètes (symétries du cube, par exemple).

En mécanique classique les symétries sont associées à des lois de conservation (l'invariance par translation donne la conservation de l'impulsion totale, l'invariance par rotation la conservation du moment cinétique, etc.).

Les propriétés de symétrie jouent un rôle encore plus important en mécanique quantique. Elles permettent d'obtenir des résultats très généraux, qui sont indépendants des approximations faites par exemple pour le Hamiltonien (bien sûr si ces approximations respectent les

symétries du problème!).

2.1.1 Conséquences de la symétrie en mécanique quantique

Considérons les fonctions d'onde sans spin d'un atome d'hélium. L'Hamiltonien du système étant invariant par échange des électrons, quand on introduit l'interaction électron-électron les fonctions d'onde sont obligatoirement soit symétriques soit antisymétriques par rapport à l'échange de deux électrons. Un autre exemple des conséquences d'une symétrie est celui de la dégénérescence des sous niveaux magnétiques d'un système isolé, qui est due à l'invariance par rotation du système. L'étude des moments de transition montrent qu'il existe des règles de sélection : les éléments de matrice de l'interaction avec le champ du rayonnement s'annulent pour certaines combinaisons des nombres quantiques. Encore une fois on peut montrer que ces règles résultent de propriétés de symétrie de l'Hamiltonien. Un exemple discret de symétrie est donné par l'oscillateur harmonique. L'Hamiltonien étant invariant par rapport à l'inversion de la coordonnée x en $-x$ autour de la position d'équilibre, les fonctions d'onde sont soit paires soit impaires (c'est la parité).

De ces exemples on conclut que l'étude des propriétés de symétrie en mécanique quantique permet :

- a. de classer et étiqueter les états propres ;
- b. de trouver les raisons de certaines dégénérescences non fortuites ;
- c. d'expliquer la levée de dégénérescence par une perturbation ;
- d. d'établir des règles de sélection pour les probabilités de transitions et d'autres éléments de matrice.

Les opérations de symétrie les plus utiles en physique atomique et moléculaire sont :

- a. Les translations dans l'espace.
- b. Les rotations dans l'espace.
- c. L'inversion par rapport à l'origine de l'espace ou parité.
- d. Les réflexions par rapport à des plans (qui sont en fait des combinaisons de rotations et de l'inversion par rapport à l'origine).
- e. L'échange entre particules identiques.

D'autres symétries sont importantes dans d'autres domaines :

- a. Les transformations relativistes.
- b. Les translations dans le temps.
- c. La conjugaison de charge.
- d. Le renversement du temps.
- e. Les transformations de jauge locales (baryoniques, électroniques, muoniques et tauoniques).

2.1.2 Propriétés générales des transformations de symétrie

Par opération de symétrie on entend toute transformation d'une quantité qui ne change pas certaines de ses propriétés. Par exemple, la rotation simultanée d'un ensemble de particules autour d'un axe n'affecte pas leur énergie d'interaction, tout comme la translation en bloc des mêmes particules. En mécanique classique, une opération de symétrie se traduit par une application de l'espace des configurations sur lui-même. Par exemple, une translation de la coordonnée x peut s'écrire $x \rightarrow x + a$, où a est une constante. En mécanique quantique, la même transformation peut être appliquée aux opérateurs observables : $\hat{x} \rightarrow \hat{x} + a$

En mécanique quantique une transformation du système physique est représentée par un opérateur tel que, quand il s'applique au vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ décrivant le système, donne le vecteur d'état transformé :

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = T |\Psi(t)\rangle. \quad (2.1)$$

Si l'opérateur T est indépendante du temps et linéaire ($T\alpha|\phi\rangle = \alpha T|\phi\rangle$) et si T a un opérateur inverse T^{-1} , alors l'évolution dans le temps du ket $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ est donné par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{H} |\tilde{\Psi}(t)\rangle, \quad (2.2)$$

où on a défini : $\tilde{H} = THT^{-1}$ l'opérateur transformé par T .

2.1.3 Opération de symétrie

Une transformation T est dite de symétrie si $\tilde{H} = H$, c'est-à-dire que l'évolution du système transformé est la même que celle sans transformation. La condition $\tilde{H} = H$ implique que

l'opérateur T commute avec H : $[H, T] = 0$.

Remarques :

► On remarque qu'une transformation de symétrie laisse l'Hamiltonien invariant, mais pas nécessairement le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$.

► L'opérateur T n'est pas nécessairement Hermitique (il n'est donc pas, en général, un observable). En fait, si l'opérateur est linéaire, il sera nécessairement unitaire (la signification physique du vecteur d'état impose la condition $\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle$, laquelle implique $TT^+ = 1$).

► Il existe de transformations plus générales que celles considérées jusqu'ici. La transformation renversement du temps, par exemple, est antilinéaire ($T\alpha |\phi\rangle = \alpha^* T |\phi\rangle$). On peut également, avoir des transformations dépendantes du temps (transformation de jauge locale, par exemple).

► Transformations des observables : Considérons un opérateur A Hermitique et sa valeur moyenne $\langle \phi | A | \phi \rangle$ qui est un nombre réel et qui correspond à une quantité mesurable (observable) si $|\phi\rangle$ est un état possible du système. Si on considère une transformation T des kets telle que : $|\tilde{\phi}\rangle = T |\phi\rangle$ on peut se demander qu'elle la nouvelle forme \tilde{A} de l'opérateur qui donne la même valeur moyenne dans l'état transformé, on obtient : $A = T^+ \tilde{A} T$ et si la transformation T est unitaire ($TT^+ = 1$) : $\tilde{A} = T A T^+$.

► La condition générale pour qu'une transformation soit de symétrie est :

$$U^+(t, t_0) T(t_0) = T(t) U(t, t_0), \quad (2.3)$$

où $U(t, t_0)$ est l'opérateur d'évolution.

2.2 Les symétries fondamentales

Dans cette section, nous allons passer en revue les transformations d'espace et de temps fondamentales en mécanique quantique non relativiste, et nous allons établir la forme de l'opérateur qui leur est associé.

Une symétrie est une transformation qui change un système physique en un autre système, lui aussi physique. Les lois physiques concernées sont invariantes

sous cette transformation. Les symétries sont des transformations qui agissent sur un objet géométrique ou un système physique en préservant :

En physique, la notion de symétrie est intimement associée à la notion d'invariance : elle renvoie à la possibilité de considérer un même système physique selon plusieurs points de vue distincts en termes de description, mais équivalents quant aux prédictions effectuées sur son évolution.

On parle donc du groupe de symétrie (ou d'invariance) de l'objet considéré : la composition de deux symétries est encore une symétrie. La correspondance entre ces deux notions - symétrie et loi d'invariance - est attribuée à **Emmy Noether** (1882-1935) en 1917 : **à toute loi de conservation correspond une symétrie continue et à toute symétrie correspond une loi de conservation** [8]. Cette correspondance est démontrée pour :

▷ la translation :

- dans le temps : conservation de l'énergie (résultat d'une expérience de physique est indépendante du choix de l'époque ou de la date à laquelle cette expérience a ou eu lieu) ;
- dans l'espace : conservation de l'impulsion (résultat d'une expérience de physique est indépendante du lieu de réalisation) ;

▷ la rotation : conservation du moment angulaire ou cinétique (résultat d'une expérience de physique est indépendante du choix de l'orientation des axes du repère servant à la décrire) ;

▷ l'invariance de jauge : conservation de la charge électrique.

2.2.1 Symétrie spatiale continue : translations et rotations

Une symétrie spatiale continue se caractérise par le fait que l'on peut lui associer des transformations infinitésimales, arbitrairement proches de la transformation identité : on peut translater un point sur une longueur aussi petite que l'on veut, ou le faire tourner d'un angle arbitrairement petit. S'en tenant strictement au plan géométrique, deux types de transformations jouent un rôle de tout premier plan en Mécanique (classique ou quantique), les translations et les rotations. À ces symétries continues s'opposent les symétries discrètes (la réflexion, la parité, le renversement du temps, . . .), pour lesquelles on ne peut définir d'opérations infinitésimales. Les translations et les rotations appartiennent à la classe des déplacements, opérations géométriques qui ne changent ni les longueurs, ni les angles, ni la chiralité. Il existe aussi, dans le plan

\mathbf{R}^2 , des transformations conformes qui modifient les longueurs mais préservent les angles.

Les translations d'espace Soit $\psi(x)$ la fonction d'onde qui décrit un état d'une particule localisée au voisinage du point x_0 . La particule subit une translation de a selon ox , donc au point $(x_0 + a)$, elle sera décrite par $\psi_a = \psi(x - a)$. La transformation $T_a \psi(x) = \psi_a(x) = \psi(x - a)$ représente la translation de a dans l'espace des fonctions d'ondes.

Ecrivons le développement de Taylor de $\psi(x)$

$$\psi_a(x) = \psi(x - a) \approx \psi(x) - a \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + \dots + (-)^n \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \psi(x). \quad (2.4)$$

en utilisant $p_x = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial x}$, on obtient

$$\begin{aligned} \psi_a(x) &= \psi(x - a) = \psi(x) - \frac{ia}{\hbar} p_x \psi(x) + \dots + (-)^n \left(\frac{ia}{\hbar} \right)^n \frac{p_x^n}{n!} \psi(x) \\ &= e^{-\frac{ia}{\hbar} p_x} \psi(x). \end{aligned} \quad (2.5)$$

On voit que la translation de a le long de l'axe ox est représentée par l'opérateur $T_a = e^{-\frac{ia}{\hbar} p_x}$. La généralisation à trois dimensions est immédiate : $T_a = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}}$.

$$T_a |\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \vec{p}} |\psi\rangle. \quad (2.6)$$

où T_a est un opérateur unitaire.

Considérons une translation de la quantité infinitésimale δa . Elle est représentée par un opérateur infiniment voisin de l'identité que l'on peut écrire

$$T_{\delta a} \approx 1 - \frac{i\delta a}{\hbar} p. \quad (2.7)$$

On en conclut que si les équations de mouvement sont laissées invariantes suite à une translation cela implique que l'impulsion est conservée, c'est-à-dire que $[T_{\delta a}, H] = T_{\delta a} H - H T_{\delta a} = 0 \Rightarrow \vec{p}$ (impulsion) totale est conservée.

Comme on étudie les translations dans l'espace, on peut aussi étudier les translations dans le temps : $t \mapsto t + a$. Cependant, le temps t n'est pas une variable dynamique en mécanique quantique : il n'y a pas d'"opérateur du temps". On peut toutefois définir un opérateur unitaire

$U(t)$, appelé opérateur d'évolution, qui effectue l'évolution temporelle du système sur un temps t . Par analogie avec les translations spatiales, l'état $|\psi(t)\rangle$ est alors obtenu de l'état $|\psi(t)\rangle$ par la relation $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(t)\rangle$. Ceci s'applique évidemment dans le point de vue de Schrödinger.

Les translations dans le temps On sait qu'à tout intervalle de temps Δt est associé un opérateur unitaire $U(\Delta t)$, et la multiplication de ces opérateurs correspond à l'addition des intervalles, c'est-à-dire l'opération même qui définit le groupe des translations de temps, ou "groupe d'évolution". La transformation U représente la translation dans le temps des fonctions d'ondes

$$U\psi(t) = \psi(t') = \psi(t + \delta t). \quad (2.8)$$

Ecrivons le développement de Taylor de $\psi(t')$

$$\psi(t') = \psi(t + \delta t) = \psi(t) + \delta t \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) + \dots \simeq (1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}) \psi(t), \quad (2.9)$$

en remplaçant l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t}$ par $-\frac{i}{\hbar}H$, l'opérateur U est alors obtenu par exponentiation de l'opérateur Hermitique H ;

$$U \simeq (1 + \delta t \frac{\partial}{\partial t}) \simeq (1 - \delta t \frac{i}{\hbar}H) = \exp(-\frac{i}{\hbar}H\delta t). \quad (2.10)$$

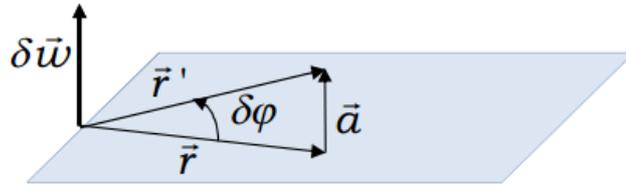
On voit que la translation temporelle est représentée par l'opérateur $\hat{U} = (1 - \delta t \frac{i}{\hbar}\hat{H})$ qui s'interprète ainsi : H est le générateur infinitésimal des translations de temps, et, pour un système isolé (énergie totale conservée), la définition la plus générale du Hamiltonien est d'être précisément ce générateur infinitésimal. Donc une observable est invariante par translation de temps si elle commute l'énergie totale.

Les Rotations Les arguments développés à propos des translations dans l'espace peuvent être repris pour les rotations. L'invariance par translation implique l'homogénéité présupposée de l'espace (supposé illimité), telle que l'affirme le principe euclidien (pas d'origine privilégiée); en ce qui concerne les rotations, c'est l'isotropie de l'espace qui est à l'œuvre (pas de direction privilégiée). Les rotations sont également des déplacements et, comme il existe des transformations infinitésimales, arbitrairement voisines de la transformation identité, les opérateurs associés aux rotations et agissant dans l'espace des états seront aussi unitaires.

La conservation du moment cinétique découle de l'invariance par rotation tout comme la conservation de l'impulsion est la conséquence de l'invariance par translation. L'invariance par rotation repose ici sur la constatation que toutes les directions dans l'espace sont physiquement équivalentes. Autrement dit, les propriétés d'un système fermé restent inchangées suite à une rotation autour de son centre de masse

L'effet de la rotation sur une fonction d'onde passe par un changement infinitésimal de la variable angulaire $\varphi \rightarrow \varphi + \delta\varphi$ (en coordonnées sphériques), soit La transformation R_z représente une rotation infinitésimale $d\varphi$ autour de l'axe z

$$R_z\psi(\varphi) = \psi(\varphi + \delta\varphi). \quad (2.11)$$



$$(2.12)$$

La transformation R peut être représentée par la translation $\vec{a} = \delta\vec{\omega} \times \vec{r}$.

$$\begin{aligned} \psi(\varphi) &\rightarrow \psi'(\varphi) = \psi(\varphi + \delta\varphi) = \psi(\varphi) + \delta\varphi \frac{\partial\psi(\varphi)}{\partial\varphi} + \mathcal{O}((\delta\varphi)^2) \\ &= \left(1 + \delta\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\psi(\varphi) + \mathcal{O}((\delta\varphi)^2) \equiv R_z\psi(\varphi) \end{aligned} \quad (2.13)$$

où R est l'opérateur infinitésimal de la rotation

$$R_z = \left(1 + \delta\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}\right) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \delta\varphi L_z\right) \quad (2.14)$$

et $L_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} = i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}\right)$ l'opérateur de moment cinétique dans la direction des z . Visiblement, p et L_z jouent des rôles analogues pour les translations et les rotations respectivement : L_z est ainsi appelé le générateur des rotations .

Une rotation finie dans l'espace par $\Delta\varphi$ s'obtient par une action répétée de la rotation infinitésimale, soit

$$R_z = \exp\left(\frac{i}{\hbar} L_z \Delta\varphi\right). \quad (2.15)$$

Pour obtenir l'opérateur associé à une rotation d'angle fini φ autour d'un axe donné, il suffit d'appliquer N fois la rotation R et de faire tendre $N \rightarrow \infty$, on obtient ainsi

$$R_{u,\varphi} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varphi \vec{u} \cdot \vec{L}\right). \quad (2.16)$$

Cet opérateur est visiblement unitaire puisque le moment cinétique \vec{L} est Hermitique.

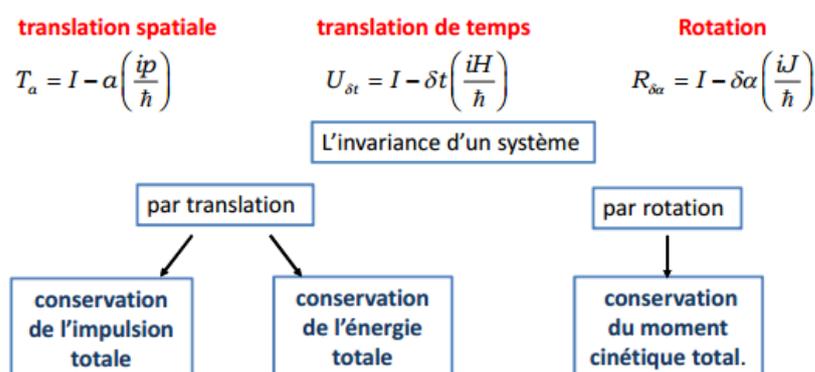
En désignant d'une façon générale par \vec{J} le moment cinétique, l'opérateur de rotation est

$$R_{u,\varphi} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\varphi \vec{u} \cdot \vec{J}\right). \quad (2.17)$$

Il est à noter que \vec{J} est l'opérateur de moment angulaire total. Lorsque le spin d'une particule est non nul

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S},$$

où \vec{L} est le moment angulaire orbital et \vec{S} est celui de spin. L'invariance par rotation implique la conservation de \vec{J} mais ne signifie pas nécessairement que \vec{L} et \vec{S} sont conservés séparément. De plus, en mécanique quantique, toutes les composantes du moment angulaire ne commutent pas entre-elles et donc seulement $|\vec{J}|^2$ et L_z sont observables simultanément. En résumé, pour les transformations continues on a les situations suivantes



(2.18)

Invariance de jauge Les éléments de symétrie d'un système ne sont pas toujours de nature géométrique. De fait, la notion d'invariance par rapport à certaines transformations peut aussi résulter de la formalisation d'un problème donné en termes d'objets qui n'ont pas en eux-mêmes une signification physique directe, même si les éléments de la réalité physique peuvent en être

déduits. C'est le cas de l'invariance de jauge, principe qui était connu depuis fort longtemps en mécanique classique. En effet, rappelons que les forces électromagnétiques (ou les champs électrique et magnétique, \vec{E} et \vec{B}) sont indépendantes du choix de la jauge ce qui n'est pas le cas des potentiels électrostatique et vecteur, ϕ et \vec{A} .

En mécanique quantique, on ne cherche pas à connaître des trajectoires mais des observables ou des densités de probabilités. Ici, la densité de probabilité doit rester invariante par rapport la multiplication de la fonction d'onde par un facteur de phase.

Une transformation de jauge est définie par la transformation unitaire

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{-ie\alpha(x)}\psi(x), \quad (2.19)$$

où e est un paramètre constant dont on verra la signification physique plus bas et $\alpha(x)$ est une fonction arbitraire :

1. Si $\alpha(x)$ est une constante arbitraire (indépendante de la position), la transformation de jauge est dite globale. Elle consiste à multiplier la fonction d'onde par le même facteur de phase quelle que soit la position. Une phase globale n'est pas observable en mécanique quantique.

2. Si $\alpha(x)$ est une fonction scalaire arbitraire dépendant de la position, la transformation de jauge est dite locale. Elle consiste à multiplier la fonction d'onde par un facteur de phase arbitraire en chaque point de l'espace. L'invariance d'un système par rapport à une telle transformation mène à des propriétés très spéciales qui sont d'une importance cruciale dans la description des théories modernes des particules élémentaires.

Deux conditions sont nécessaires à l'invariance par une transformation de jauge locale :

- i. Il doit exister un champ A_μ à longue portée qui agit sur les particules et qui change la phase de leur fonction d'onde.

- ii. La charge électrique e doit être conservée.

2.2.2 Symétries discrètes

Toutes les symétries rencontrées jusqu'à présent sont associées à des transformations continues, au sens où celles-ci dépendent continûment d'un paramètre (angle de rotation, amplitude de la translation, charge électrique pour la transformation de jauge, etc.). En conséquence, il existe des transformations infinitésimales, aussi proches que l'on veut de la transformation identité ; ceci assure que les opérateurs associés ne sauraient être antiunitaires : par le théorème de Wigner, ils sont donc forcément unitaires.

Il existe aussi des opérations de symétrie discrètes ; par exemple l'inversion d'espace, traditionnellement appelée parité en Mécanique quantique.

L'opération parité : symétrie d'espace par rapport à l'origine

L'opération parité consiste à inverser le signe des coordonnées : $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$.

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

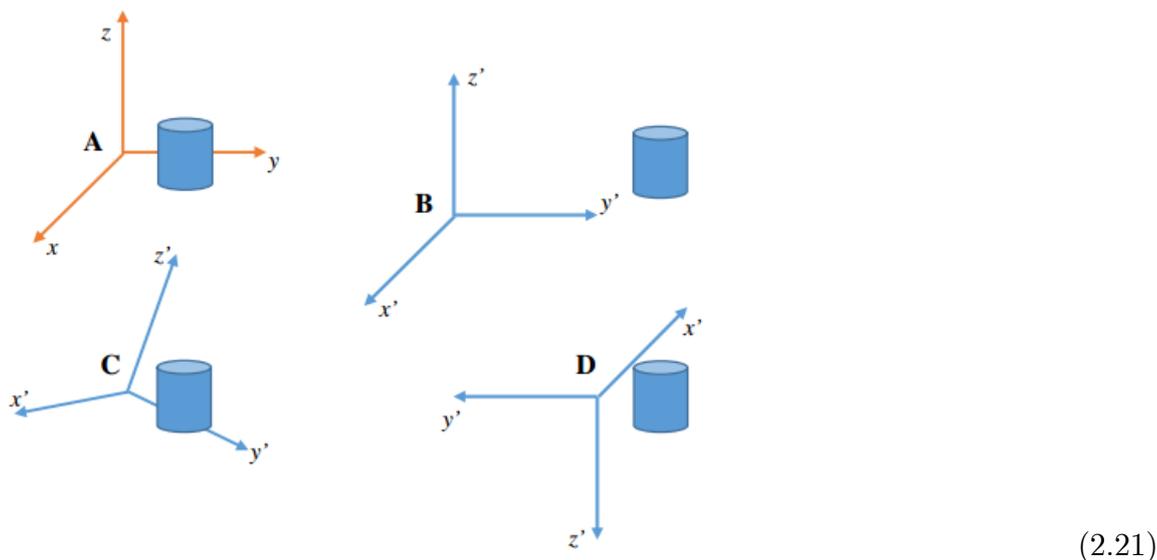


Figure I. Transformation de la symétrie spatiale

A) Translation de l'origine des coordonnées **B)** Rotation de l'origine des coordonnées.

C) Rotation de l'origine des coordonnées. **D)** Renversement de l'origine des coordonnées.

Comme l'invariance par rotation est en général valable, on exprime de façon imagée l'invariance par parité en disant que l'image dans un miroir d'une expérience de physique doit apparaître comme physiquement possible. L'opération parité agit différemment sur les vecteurs proprement dits, ou vecteurs polaires comme la position \vec{r} , l'impulsion \vec{p} ou le champ électrique \vec{E}

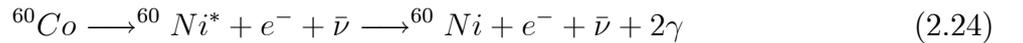
$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r}, \quad \vec{p} \rightarrow -\vec{p}, \quad \vec{E} \rightarrow -\vec{E}, \quad (2.22)$$

et sur les pseudo vecteurs, ou vecteurs axiaux, comme le moment angulaire \vec{j} ou le champ magnétique \vec{B} , qui sont associés à un sens de rotation autour d'un axe, et non à une direction

$$\vec{j} \rightarrow \vec{j}, \quad \vec{B} \rightarrow \vec{B}, \quad (2.23)$$

Rappelons que le produit vectoriel de deux vecteurs polaires $\vec{j} = \vec{r} \times \vec{p}$ est un vecteur axial. La transformation correspondant à la réflexion dans l'espace définit l'opérateur de parité sur la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t) \rightarrow \Psi'(\vec{r}, t) = \mathcal{P}\Psi(\vec{r}, t) = \Psi(-\vec{r}, t)$.

Les interactions faibles ne respectent pas l'invariance par parité : ceci a été montré pour la première fois par C.S. Wu [9], en utilisant la désintégration β de noyaux de ^{60}Co polarisés en un état excité du ^{60}Ni



La valeur moyenne du moment angulaire $\langle \vec{J} \rangle$ du ^{60}Co a une orientation fixée (voir Figure II). On constate que les électrons de la désintégration sont émis de façon préférentielle dans la direction opposée à celle du moment angulaire : si \vec{P} est l'impulsion des électrons, $\langle \vec{J} \cdot \vec{P} \rangle < 0$. Mais $\langle \vec{J} \cdot \vec{P} \rangle$, valeur moyenne du produit scalaire d'un vecteur polaire et d'un vecteur axial, est un pseudo-scalaire, qui change de signe dans une opération parité.

L'expérience vue dans le miroir est différente de l'expérience réalisée avec un appareil identique à celui vu dans le miroir. L'interaction faible viole la parité. En d'autres termes, on peut distinguer un phénomène physique de son image dans un miroir. L'image de l'expérience dans un miroir (Figure II) n'apparaît pas comme physiquement possible : dans le miroir les sens de rotation sont inversés, et les électrons partent préférentiellement dans la direction de \vec{J} .

Expérimentalement, Il suffit de voir dans quelle direction l'électron est émis pour déterminer si l'on voit le vrai phénomène ou son image dans un miroir :

- Si les électrons étaient toujours émis dans la même direction et dans la même proportion que les rayons gamma, la conservation de la parité serait vraie.
- Si la distribution des électrons ne suivait pas la distribution des rayons gamma, alors la violation de la parité serait établie.

Wu a observé que les électrons étaient émis dans une direction préférentiellement opposée à celle des rayons gamma.

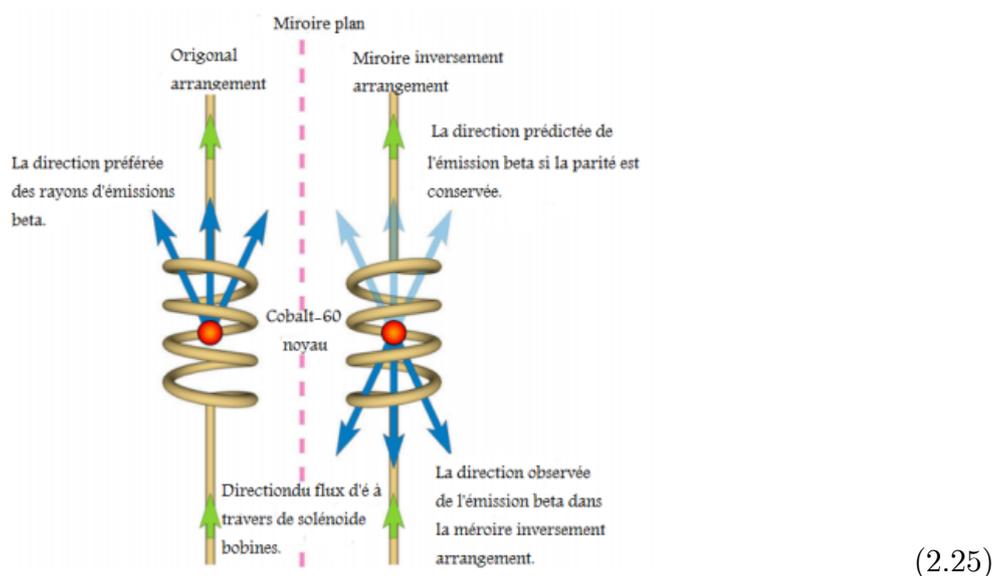


Figure II. L'expérience de désintégration du cobalt polarisé et son image dans un miroir.

Le groupe \mathcal{G} correspondant à l'opération parité est le groupe multiplicatif à deux éléments $\{+1, -1\}$. Comme on ne peut pas relier continûment -1 à l'identité, il nous faut trouver un argument pour décider si l'opérateur \mathcal{P} , qui représente l'opération parité dans l'espace des états, est unitaire ou antiunitaire. Soit $|\chi\rangle$ et $|\phi\rangle$ deux vecteurs arbitraires et $(|\chi\rangle, |\phi\rangle)$ leur produit scalaire. Si la parité est une symétrie,

$$|(\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}|\phi\rangle)| = |(|\chi\rangle, |\phi\rangle)|. \quad (2.26)$$

Comme dans l'opération parité, les opérateurs position et impulsion doivent se transformer tous deux comme des vecteurs :

$$\vec{r} \rightarrow \mathcal{P}^{-1}\vec{r}\mathcal{P} = -\vec{r} \quad (2.27)$$

$$\vec{p} \rightarrow \mathcal{P}^{-1}\vec{p}\mathcal{P} = -\vec{p}, \quad (2.28)$$

leur commutateur est inchangé

$$\mathcal{P}^{-1}[x_i, p_j]\mathcal{P} = i\hbar\delta_{ij}I. \quad (2.29)$$

Examinons l'élément de matrice

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}[x_i, p_j]|\phi\rangle) &= (\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}[x_i, p_j]\mathcal{P}^{-1}\mathcal{P}|\phi\rangle) \\ &= (\mathcal{P}|\chi\rangle, i\hbar\delta_{ij}\mathcal{P}|\phi\rangle) = i\hbar\delta_{ij}(\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}|\phi\rangle). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Mais, on a également

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}[x_i, p_j]|\phi\rangle) &= (\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}i\hbar\delta_{ij}|\phi\rangle) \\ &= i\hbar\delta_{ij}(\mathcal{P}|\chi\rangle, \mathcal{P}|\phi\rangle), \end{aligned} \quad (2.31)$$

si l'on suppose que \mathcal{P} est unitaire. En effet, pour un opérateur unitaire

$$(U|\chi\rangle, Ui\phi) = (|\chi\rangle, i|\phi\rangle) = i(|\chi\rangle, |\phi\rangle), \quad (2.32)$$

tandis que pour un opérateur antiunitaire

$$(U|\chi\rangle, Ui|\phi\rangle) = (i|\phi\rangle, |\chi\rangle) = i(|\phi\rangle, |\chi\rangle), \quad (2.33)$$

Les équations (2.30) et (2.31) sont compatibles uniquement si \mathcal{P} est unitaire. En revanche, si au lieu de la parité \mathcal{P} on considère le renversement du sens du temps $\mathcal{T} : \vec{r} \rightarrow \vec{r}$ et $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$, alors

$$\mathcal{T}[x_i, p_j]\mathcal{T}^{-1} = -[x_i, p_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad (2.34)$$

et ce changement de signe entraîne que \mathcal{T} est antiunitaire.

Renversement du sens du temps

Le renversement du temps en physique classique En mécanique classique, l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 \vec{r}(t)}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(t)), \quad (2.35)$$

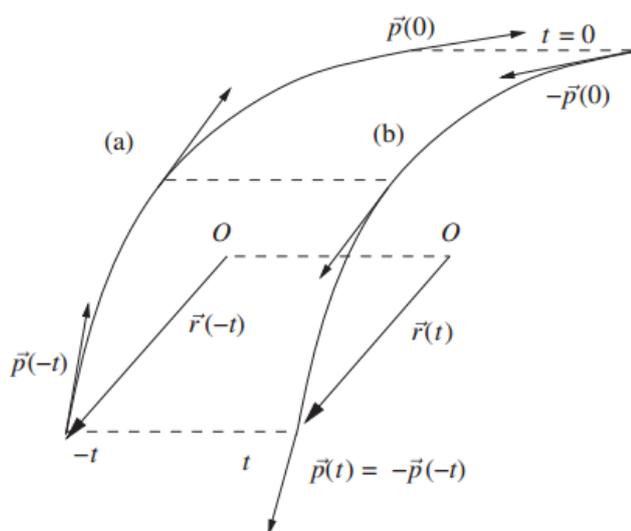
est invariante par renversement du sens du temps $t \rightarrow -t$. Posons en effet $\vec{r}'(t) = \vec{r}(-t)$

$$m \frac{d^2 \vec{r}'(t)}{dt^2} = m \frac{d^2 \vec{r}(-t)}{dt^2} = \vec{F}(\vec{r}(-t)) = \vec{F}(\vec{r}'(t)), \quad (2.36)$$

On constate que $\vec{r}'(t)$ obéit bien aux équations de Newton. La raison en est évidemment que ces équations ne dépendent que de la dérivée seconde par rapport au temps de r et pas de la dérivée première.

Une image intuitive du renversement du temps est la suivante : imaginons que nous suivions la trajectoire d'une particule de $t = -\infty$ à $t = 0$ et qu'à $t = 0$, nous renversions brutalement le sens de l'impulsion (ou de la vitesse) : $p(0) \rightarrow -p(0)$. Dans ces conditions, la particule va "remonter sa trajectoire", elle repassera au temps t par la position qu'elle avait au temps $-t$ avec une impulsion opposée (Figure III)

2



7.png

Figure III. Renversement du temps sur une trajectoire classique.

$$\vec{r}'(t) = \vec{r}(-t) \quad \vec{p}'(-t) \rightarrow -\vec{p}(t) \quad (2.37)$$

Le vecteur position \vec{r} est pair par renversement du temps, et \vec{p} est impair dans cette même opération. L'invariance par renversement du temps est appelée microréversibilité. Si l'on filme le mouvement de particules et que l'on projette la projection apparaît physiquement possible. On sait que tel n'est pas le cas dans la vie courante, qui est fondamentalement irréversible, et il n'est pas évident de comprendre comment une dynamique réversible à l'échelle microscopique peut conduire à des phénomènes irréversibles à l'échelle macroscopique.

Le renversement du temps en mécanique quantique Revenons à la mécanique quantique, en appelant $\tilde{\mathcal{T}}$ l'opérateur qui réalise le renversement du temps dans \mathcal{E} . Cet opérateur est l'analogie temporel de la réflexion de l'espace doit transformer \vec{r} et \vec{p} suivant

$$\begin{cases} \tilde{\mathcal{T}}\vec{r}\tilde{\mathcal{T}}^{-1} = \vec{r}, \\ \tilde{\mathcal{T}}\vec{p}\tilde{\mathcal{T}}^{-1} = -\vec{p} \\ \tilde{\mathcal{T}}\vec{j}\tilde{\mathcal{T}}^{-1} = -\vec{j}. \end{cases} \quad (2.38)$$

En effet, \vec{j} doit se transformer comme $\vec{r} \times \vec{p}$, qui est impair par renversement du temps : le moment angulaire définit un sens de rotation qui est inversé par renversement du temps.

On définit l'opérateur de renversement du temps, $\tilde{\mathcal{T}}$, sur une fonction d'onde par

$$\psi(\vec{r}, t) \longrightarrow \psi'(\vec{r}, t) = \tilde{\mathcal{T}}\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, -t). \quad (2.39)$$

À titre d'exemple, mentionnons quelques quantités ou opérateurs qui se transforment par renversement du temps selon les règles suivantes :

$$\begin{pmatrix} t \\ \vec{r} \\ \vec{p} \\ \vec{\sigma}, \vec{j}, \vec{L} \\ \vec{E} \\ \vec{B} \end{pmatrix} \xrightarrow{\tilde{\mathcal{T}}} \begin{pmatrix} -t \\ \vec{r} \\ -\vec{p} \\ -\vec{\sigma}, -\vec{j}, -\vec{L} \\ \vec{E} \\ -\vec{B} \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Malgré l'analogie entre $\tilde{\mathcal{T}}$ et \mathcal{P} , il est facile de démontrer que $\tilde{\mathcal{T}}$ ne peut être un opérateur unitaire. En effet, une relation importante de la mécanique quantique, la relation de commutation $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ devient $[x_i, p_j] = -i\hbar\delta_{ij}$ après renversement du temps et n'est donc pas préservée. $\tilde{\mathcal{T}}$ ne peut donc pas être unitaire et par conséquent, ne possède pas de valeurs propres et on ne peut y associer des observables.

Nous voulons construire une transformation qui renverse le temps tout en préservant $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Pour y arriver, il suffit de combiner $\tilde{\mathcal{T}}$ à la transformation dite anti-unitaire \mathcal{K} qui transforme un nombre complexe en son complexe conjugué. Définissons maintenant $\mathcal{T} = \mathcal{K}\tilde{\mathcal{T}}$ tel que

$$\mathcal{T} = \mathcal{K}\tilde{\mathcal{T}} : \quad \begin{cases} x_i \\ p_i \\ i \end{cases} \xrightarrow{\mathcal{T}} \begin{cases} \mathcal{T}x_i\mathcal{T}^{-1} = x_i \\ \mathcal{T}p_i\mathcal{T}^{-1} = -p_i \\ \mathcal{T}i\mathcal{T}^{-1} = -i \end{cases} . \quad (2.41)$$

L'examen de la transformation par \mathcal{T} des relations de commutation canoniques montre que \mathcal{T} doit être antiunitaire. Calculons de deux façons différentes un élément de matrice du commutateur $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$

$$\begin{aligned} (\mathcal{T}|\varphi\rangle, \mathcal{T}[x_i, p_j]|\psi\rangle) &= (\mathcal{T}|\varphi\rangle, \mathcal{T}i\hbar\delta_{ij}I|\psi\rangle) = \hbar\delta_{ij}(|\varphi\rangle, i|\psi\rangle)^* = -i\hbar\delta_{ij}(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)^* \\ &= (\mathcal{T}|\varphi\rangle, \mathcal{T}[x_i, p_j]\mathcal{T}^{-1}\mathcal{T}|\psi\rangle) \\ &= (\mathcal{T}|\varphi\rangle, -i\hbar\delta_{ij}I\mathcal{T}|\psi\rangle) = -i\hbar\delta_{ij}(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)^* \end{aligned} \quad (2.42)$$

où nous avons utilisé dans la seconde ligne les lois de transformation (2.38) de x_i et p_j

$$\mathcal{T}[x_i, p_j]\mathcal{T}^{-1} = -[x_i, p_j] \quad (2.43)$$

Les deux lignes de l'équation précédente sont compatibles, ce qui ne serait pas le cas si la transformation \mathcal{T} était unitaire.

Il existe un autre argument très instructif prouvant le caractère antiunitaire de \mathcal{T} . Soit $|\varphi(t)\rangle$, le vecteur d'état d'un système quantique au temps t , $|\varphi\rangle = |\varphi(t=0)\rangle$ son état au temps $t=0$

$$|\varphi(t)\rangle = e^{-iHt}|\varphi\rangle . \quad (2.44)$$

L'invariance par rapport au renversement du temps implique que l'état transformé de $|\varphi(-t)\rangle$ par renversement du temps, $\mathcal{T}|\varphi(-t)\rangle$, coïncide avec l'état obtenu par évolution temporelle de $\mathcal{T}|\varphi(t=0)\rangle$

$$\mathcal{T}|\varphi(-t)\rangle = e^{-iHt}\mathcal{T}|\varphi\rangle. \quad (2.45)$$

et comme les équations sont valables pour tout $|\varphi\rangle$

$$\mathcal{T}e^{iHt} = e^{-iHt}\mathcal{T}. \quad (2.46)$$

Si \mathcal{T} était unitaire, cela impliquerait que

$$\mathcal{T}H = -H\mathcal{T}$$

et à tout vecteur propre $|\varphi_E\rangle$ de H d'énergie E correspondrait un vecteur propre $\mathcal{T}|\varphi_E\rangle$ avec une énergie $-E$. Dans ces conditions, l'énergie ne serait pas bornée inférieurement et il existerait une instabilité fondamentale. Si au contraire \mathcal{T} est antiunitaire puisque dans ce cas $\mathcal{T}i = -i\mathcal{T}$, grâce à $\mathcal{T}iH = -iH\mathcal{T}$ l'équation (2.46) implique

$$\mathcal{T}H = H\mathcal{T} \quad \text{ou} \quad \mathcal{T}H\mathcal{T}^{-1} = H$$

Cette dernière équation traduit l'invariance de H par renversement du sens du temps et implique donc que \mathcal{T} et H doivent commuter.

Pour une particule sans spin, l'opération de renversement du temps est simplement la conjugaison complexe. En effet, si $\psi(\mathbf{r}, t)$ vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})\right)\psi(\vec{r}, t), \quad (2.47)$$

en changeant t en $-t$ dans cette équation on voit que $\psi(\mathbf{r}, -t)$ n'est pas solution de la même équation. En effet,

si $\psi(\mathbf{r}, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger c'est la fonction $\psi_{renv}(\mathbf{r}, t)$ définie par :

$$\psi_{renv}(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, -t) \quad (2.48)$$

qui est solution de la même équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, -t) = \left(\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right) \psi^*(\vec{r}, -t), \quad (2.49)$$

pourvu que le potentiel $V(\vec{r})$ soit réel. Les fonctions $\psi(\vec{r}, -t)$ et $\psi^*(\vec{r}, -t)$ solutions différentes de la même équation de Schrödinger se correspondent par renversement du temps sont en général deux solutions différentes de la même équation de Schrödinger. L'invariance de l'équation de Schrödinger par renversement du temps porte le nom de principe de micro-réversibilité, voir [3]. Tout comme dans le cas classique cette symétrie est brisée lorsque la particule est soumise à un champ magnétique (champ semi-classique donc nécessairement extérieur au système quantique).

D'après l'Eq. (2.48), le renversement du temps en mécanique quantique est intimement lié à la conjugaison complexe. L'action de l'opérateur \mathcal{K} dans l'espace des états est défini par :

$$\psi_{renv}(\vec{r}, t) = \mathcal{K}\psi(\vec{r}, -t) \quad (2.50)$$

Notons d'emblée que, puisque t est un paramètre en mécanique quantique, l'opérateur \mathcal{K} ne peut agir sur t . Comme en mécanique classique, le changement t en $-t$ doit se faire "à la main" en mécanique quantique. L'opérateur \mathcal{K} , qui porte toutefois le nom d'opérateur de renversement du temps, est chargé des opérations qui n'ont pas d'équivalent classique. En représentation-position et pour une particule sans spin, \mathcal{K} est simplement l'opérateur de conjugaison complexe :

$$\psi_{renv}(\vec{r}, t) = \mathcal{K}\psi(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t), \quad (\text{particule sans spin}) \quad (2.51)$$

En résumé

- Un opérateur de translation, rotation... agissant sur une variable classique est représenté, en mécanique quantique, par un opérateur de translation, rotation... agissant dans l'espace des états. Les opérateurs, classiques et quantiques, ont les mêmes propriétés de groupe. En mécanique quantique, la représentation est définie à une phase près.

- En mécanique quantique, le principe de relativité de Galilée implique l'égalité en module du produit scalaire. Ceci impose une contrainte aux opérateurs modélisant une transformation en mécanique quantique : ils doivent être unitaires ou anti-unitaires. De tels opérateurs sont parfois qualifiés d'opérateurs de symétrie (mais cela n'a rien à voir avec la symétrie propre au système).

- Les opérateurs de symétrie les plus courants sont des opérateurs unitaires. C'est le cas des opérateurs de translations et rotation.

- A un opérateur de symétrie (translation, rotation) est associé un générateur (impulsion, moment cinétique). Il s'agit du générateur de la transformation représentée par l'opérateur de symétrie.

- Un système est invariant sous l'action d'un opérateur de symétrie lorsque son hamiltonien commute avec cet opérateur ou son générateur. A l'invariance (symétrie propre au système) est associée une loi de conservation (le générateur est une constante du mouvement). Il faut savoir mettre en évidence les symétries et déterminer les constantes du mouvement associées en mécanique quantique. Pour le faire, le point de vue de Heisenberg est particulièrement bien adapté.

- Les transformations de jauge sont des transformations locales du type. On rencontre ce type de transformation lors de l'étude de la dynamique (classique ou quantique) d'une particule soumise à un champ électromagnétique.

- En mécanique classique comme en mécanique quantique la physique est invariante de jauge, c'est-à-dire invariante sous l'action d'une transformation de jauge. En mécanique quantique, ceci se traduit par le fait que l'équation de Schrödinger garde la même forme lors d'une transformation de jauge.

- La fonction d'onde transformée de jauge est, à une phase locale près, égale à la fonction non transformée (2.19).

- En pratique, les calculs sont menés pour un choix de jauge donné (jauge de Coulomb par exemple).

- Les symétries discrètes les plus importantes sont la parité et le renversement du temps.

- Selon leur transformation sous l'action de la parité les grandeurs physiques peuvent être des scalaires ou des pseudo-scalaires, des vecteurs ou des pseudo-vecteurs.

- Les symétries discrètes ne sont pas forcément représentées par des opérateurs unitaires. Le renversement du temps (qui correspond à l'opération de conjugaison complexe) est représenté par un opérateur anti-unitaire, c'est-à-dire un opérateur anti-linéaire et unitaire.

La Figure IV schématise, les symétries spatiales et discrètes qui jouent un rôle très spécial

en physique fondamentale :

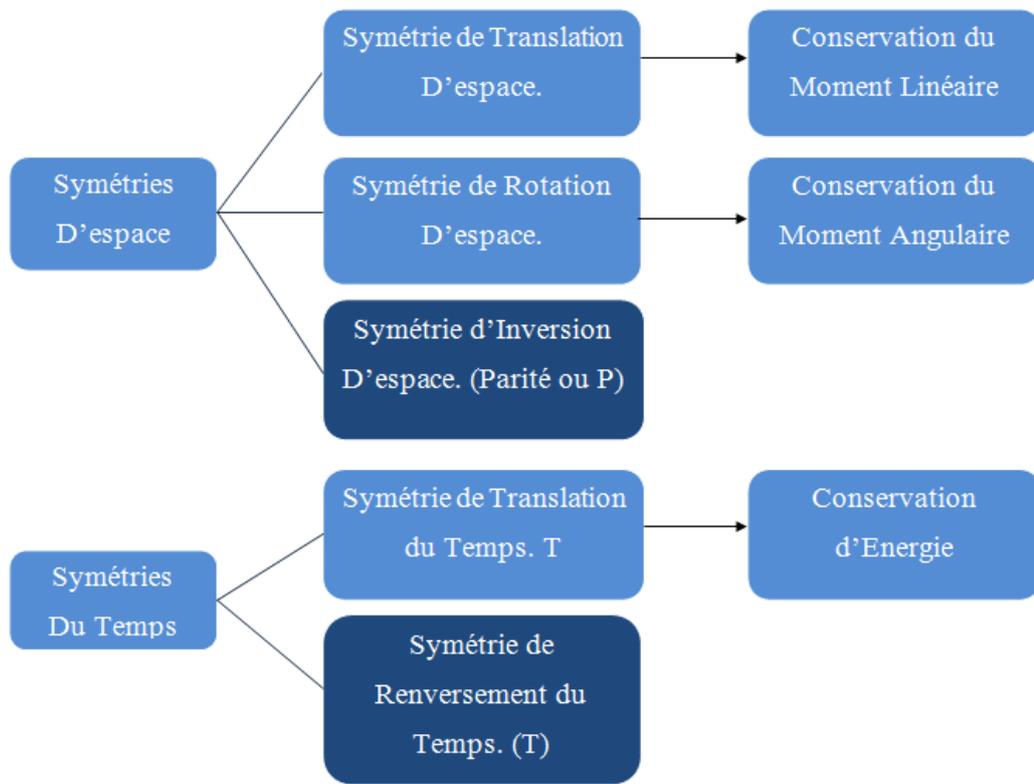


Figure IV. Les symétries d'espace et du temps.

Chapitre 3

Systemes quantiques dependants du temps

Si le Hamiltonien a une dependance temporelle, il est generalement impossible de resoudre l'equation de Schrödinger associee

$$i\hbar\partial_t |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (3.1)$$

ou l'Hamiltonien $H(t)$ depend du temps a travers des parametres classiques $\{X_i(t), i = 1, 2, \dots\}$, ces derniers peuvent représenter l'interaction du systeme considere avec des champs externes dependant du temps (champ électrique, champ magnétique, ...) ou, tout simplement, des parametres internes dependant du temps (la masse, la charge, la profondeur d'un puits de potentiel, ...) [3, 11, 12]. Pour resoudre l'equation de Schrödinger (3.1), Il est necessaire d'utiliser d'approximations telle que : la theorie des perturbations dependante du temps, l'approximation soudaine, l'approximation adiabatique ou aussi la methode exacte mais formelle de la theorie des invariants de Lewis et Riesenfeld [13, 14].

En generale, le but de la resolution de l'equation de Schrödinger (3.1) la solution $|\Psi(t)\rangle$ a partir de la donnee de la condition initiale $|\Psi(t_0)\rangle$. Il est possible de reformuler la dynamique des systemes quantiques a l'aide de l'operateur d'evolution $U(t, t_0)$ (Voir equation (1.31)).

Recemment, deux methodes ont eu un interet considerable que ce soit sur le plan theorique ou experimental, a savoir l'approximation adiabatique reposant sur le theoreme adiabatique et

la théorie des invariants de Lewis et Riesenfeld [13, 14]. L'importance des deux méthodes vient du fait que le problème (3.1) se réduit à un problème de calcul de phases, en particulier la partie dite géométrique.

Les premiers travaux sur l'approximation adiabatique en mécanique quantique sont dus à M. Born et V. Fock [?] qui constituent une extension des travaux d'Ehrenfest [?] en mécanique classique et l'ancienne théorie des Quanta [3, 11, 12, 15]. Dès lors, aucune intention pour examiner l'approximation adiabatique n'est concernée. Mais à partir des années cinquante, il y avait eu un réveil d'intérêt intense dans le sujet [16]. Des applications pratiques ont été trouvées en physique des plasmas, technologie de fusion, accélérateurs des particules chargées, et même dans l'astronomie galactique [17].

3.1 Régimes soudain et adiabatique

On procède au changement de variable dans l'équation de Schrödinger consistant à passer en temps réduit $s = \frac{t}{T} \in [0, 1]$ où T est la durée de l'interaction considérée.

$$i\hbar \frac{dU_T(s, 0)}{ds} = TH(s)U_T(s, 0). \quad (3.2)$$

On s'intéresse aux deux régimes dynamiques extrêmes, le régime soudain où le paramètre $T \ll$ (l'interaction est très rapide), et le régime adiabatique où $T \gg$ (l'interaction est très lente).

3.1.1 Approximation soudaine

Dans le régime soudain on a

$$U_T(s, 0) = 1 - \frac{i}{\hbar} T \int_0^s H(s')U_T(s', 0)ds' = 1 + O(T). \quad (3.3)$$

En première approximation, pour une interaction très rapide, l'opérateur d'évolution est réduit à l'identité. Le système n'ayant pas le temps de s'adapter à la modification, il reste sur son état originel. Supposons par exemple que $H(t) = H_0$ pour $t < 0$ et $H(t) = H_1$ pour $t > 0$ avec T au voisinage de 0. Si l'état initial du système était un état propre ψ_0 de H_0 , après l'interaction

$|\psi_0\rangle$ est toujours l'état du système. Il n'est plus néanmoins état propre de l'Hamiltonien qui est devenu H_1 et un phénomène d'oscillations de Rabi doit apparaître.

L'erreur commise dans l'approximation soudaine est

$$e = \langle \psi_0 | U_T(1,0)^+ (1 - |\psi_0\rangle \langle \psi_0| U_T(1,0) |\psi_0\rangle), \quad (3.4)$$

avec $|\psi_0\rangle$ état initial normé. En utilisant la décomposition de $U_T(1,0)$ en série de Dyson, il vient

$$e = \frac{T^2}{\hbar^2} \int_0^1 \int_0^1 \langle \psi_0 | H(s_1) H(s_2) | \psi_0 \rangle ds_1 ds_2 \quad (3.5)$$

$$- \frac{T^2}{\hbar^2} \int_0^1 \int_0^1 \langle \psi_0 | H(s_1) | \psi_0 \rangle \langle \psi_0 | H(s_2) | \psi_0 \rangle ds_1 ds_2 + O(T^3). \quad (3.6)$$

On note $\Delta \bar{H}^2 = \langle \bar{H}^2 \rangle - \langle \bar{H} \rangle^2$ la variance dans l'état ψ_0 de la moyenne temporelle de l'Hamiltonien $\bar{H} = \int_0^1 H(s) ds$, on a alors

$$e = \frac{T^2}{\hbar^2} \Delta \bar{H} + O(T^3). \quad (3.7)$$

On voit donc que la condition pour que l'approximation soudaine soit valide est

$$T \ll \frac{\hbar}{\Delta \bar{H}}. \quad (3.8)$$

3.1.2 Approximation adiabatique

L'approche utilisée sera légèrement différente de l'originale proposée par M.V. Berry [18] qui introduit l'hypothèse adiabatique dès le départ.

Dans le régime adiabatique, on a le résultat suivant :

Théorème (Théorème adiabatique). Soit $H(s)$ un Hamiltonien Hermitique. Soient $\{\lambda_i(s)\}$ les valeurs propres instantanées du spectre pur point de $H(s)$ et $P_i(s)$ les projecteurs orthogonaux sur les sous-espaces propres instantanés associés. On suppose que $\lambda_i(s)$ est isolé tout au long de l'évolution du reste du spectre, i.e. $\forall s \in [0, 1], \forall j \neq i, \lambda_i(s) \neq \lambda_j(s)$. On suppose de plus que $P_i(s)$ est de classe C^2 par rapport à s sur $[0, 1]$.

Alors

$$U_T(s, 0)P_i(0) = P_i(s)U_T(s, 0) + O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (3.9)$$

Le théorème adiabatique énonce donc que si la condition initiale est choisie sur un état propre de l'Hamiltonien, il reste sur l'état propre relié au premier par continuité en s (si la valeur propre associée reste isolée dans le spectre). L'idée est que l'évolution étant très lente, le système a toujours le temps de s'adapter au changement. Si à l'instant initial il se trouve sur un état propre (version quantique d'un état d'équilibre), il restera sur la déformation avec le temps de cet état propre (le "transport lent" du système ne lui fait pas "perdre l'équilibre").

On ne donnera pas de démonstration rigoureuse du théorème adiabatique. On va néanmoins donner un argument dans un cas simple. Supposons tout d'abord que H ne présente que du spectre purement ponctuel et pour simplifier que ces valeurs propres sont non-dégénérées (la généralisation aux cas dégénérés ne pose pas de problème particulier). Soit $|\phi_j(s)\rangle$ le vecteur propre instantané associé à $\lambda_j(s)$:

$$H(s) |\phi_j(s)\rangle = \lambda_j(s) |\phi_j(s)\rangle. \quad (3.10)$$

On suppose que $|\Psi(0)\rangle = |\phi_i(0)\rangle$. L'ensemble des vecteurs propres formant une base ortho-normée, $|\Psi(s)\rangle$ peut à tout instant être décomposé sur celle-ci :

$$|\Psi(s)\rangle = \sum_j c_j(s) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}T \int_0^s \lambda_j(s') ds'\right) |\phi_j(s)\rangle, \quad (3.11)$$

où on a choisi de "sortir" les phases dynamiques des coefficients de décomposition c_j . On a alors

$$\frac{i\hbar}{T} |\Psi(s)\rangle' = H |\Psi(s)\rangle \Leftrightarrow \sum_j \frac{i\hbar}{T} c_j' e^{i\varphi_j} \phi_j + c_j \lambda_j e^{i\varphi_j} \phi_j + \frac{i\hbar}{T} c_j e^{i\varphi_j} |\varphi_j\rangle = \sum_j c_j e^{i\varphi_j} \lambda_j |\phi_j\rangle. \quad (3.12)$$

où l'indice " ' " indique la dérivation par rapport au temps réduit s . En projetant cette dernière équation sur $e^{-i\varphi_i} \langle \phi_i |$ on trouve

$$c_i' = - \sum_j e^{\frac{i}{\hbar}T \int_0^s (\lambda_i(s') - \lambda_j(s')) ds'} \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_j. \quad (3.13)$$

Donc

$$c_i(s) = c_i(0) - \sum_j \int_0^s e^{\frac{i}{\hbar}T (\lambda_i(s') - \lambda_j(s'))} \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_j ds'. \quad (3.14)$$

Si les valeurs propres étaient indépendantes du temps (mais pas les vecteurs propres), alors on aurait pour $i \neq j$

$$\int_0^s e^{\frac{i}{\hbar}T(\lambda_i(s')-\lambda_j(s'))} \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_j ds' = \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar}T(\lambda_i-\lambda_j)_s} \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_j}{\frac{i}{\hbar}T(\lambda_i-\lambda_j)} \right]_0^s \quad (3.15)$$

$$- \int_0^s \frac{e^{\frac{i}{\hbar}T(\lambda_i-\lambda_j)_s}}{\frac{i}{\hbar}T(\lambda_i-\lambda_j)} \frac{d}{ds} \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_j ds = O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (3.16)$$

Ce résultat reste vrai avec des valeurs propres dépendantes du temps (théorème de Riemann-Lebesgue : l'intégration d'une fonction complexe ayant une phase oscillant à une "vitesse infinie" est nulle). Il vient donc que

$$c_i(s) = c_i(0) - \int_0^s \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_i(s') ds' + O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (3.17)$$

On reconnaît là une propriété de la fonction exponentielle :

$$c_i(s) = e^{-\int_0^s \langle \phi_i | \phi_j' \rangle c_i(s') ds'} c_i(0) + O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (3.18)$$

or $c_i(0) = 1$ et $\langle \phi_i | \phi_i' \rangle = 1 \in \mathbb{R}$ (car $\langle \phi_i | \phi_i \rangle = 1 \Rightarrow \langle \phi_i' | \phi_i \rangle + \langle \phi_i | \phi_i' \rangle = 2\Re \langle \phi_i | \phi_i' \rangle = 0$).

On a donc $|c_i(s)|^2 = 1$.

L'évolution conservant la norme, il vient que $c_i(s) = 0, \forall i \neq j$. Finalement

$$\psi(s) = e^{-\frac{i}{\hbar}T \int_0^s \lambda_i(s') ds'} e^{-\int_0^s \langle \phi_i(s') | \frac{d}{ds} | \phi_i(s') \rangle ds'} \phi_i(s') + O\left(\frac{1}{T}\right). \quad (3.19)$$

Ce qui prouve l'approximation adiabatique dans les conditions énoncées plus haut. Le terme $e^{-\int_0^s \langle \phi_i(s') | \frac{d}{ds} | \phi_i(s') \rangle ds'}$ est appelé phase de Berry ou phase géométrique. La phase de Berry est un concept quantique simple d'une signification physique, géométrique et topologique très profonde. La phase de Berry a été étendue par exemple à des états quantiques dégénérés, à des évolutions non adiabatiques non cycliques, non Hamiltonienne, non linéaires; des connexions ont été établies avec des problèmes théoriques connus comme les anomalies en théorie quantique des champs ou les statistiques fractionnaires en physique du solide; des vérifications expérimentales ont été faites dans des domaines aussi variés que la physique nucléaire, la physique atomique ou l'optique.

On terminera cette analyse par remarquer que la condition de validité de l'approximation adiabatique est

$$T \gg \hbar \sup_{s \in [0,1]} \left| \frac{\langle \phi_i | \frac{d}{ds} | \phi_j \rangle}{\lambda_i(s) - \lambda_j(s)} \right|, \forall i \neq j.$$

Ce qui suppose que la durée de l'interaction T soit beaucoup plus grande que les durées de transition entre les états propres $\frac{\hbar}{\lambda_i(s) - \lambda_j(s)}$ et que les couplages non-adiabatiques $\langle \phi_i | \frac{d}{ds} | \phi_j \rangle$ soient petits.

3.2 Généralisation à la théorie des invariants

3.2.1 Théorie quantique des invariants

Certaines grandeurs physiques scalaires et vectorielles se conservent au cours du mouvement. Elles servent alors à caractériser le mouvement. On les appelle invariants ou constantes du mouvement. La théorie des invariants (ou de Lewis et Riesenfeld) [13, 14] constitue une méthode pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendante du temps, elle permet d'obtenir la solutions de l'équation de Schrödinger (3.1) en fonction des états propres de l'opérateur invariant Hermitique $\hat{I}(t) \equiv I(t)$ vérifiant l'équation de Von-Neuman

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] = 0. \quad (3.20)$$

Nous constatons que l'action de l'invariant sur un vecteur d'état $|\Psi\rangle$ solution de l'équation de Schrödinger (3.1) est aussi solution de l'équation Schrödinger suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I(t) |\Psi(t)\rangle) = H(t) (I(t) |\Psi(t)\rangle). \quad (3.21)$$

Supposons que l'opérateur invariant $I(t)$ admet un ensemble d'états propres $|\phi_{\lambda,k}\rangle$

$$I(t) |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle = \lambda |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle, \quad (3.22)$$

qui lui correspondent des valeurs propres λ , où k représente tous les autres nombres quantiques nécessaire spécifiant les états propres de $I(t)$ (car cet opérateur peut avoir un spectre dégénéré).

Ces fonctions propres sont supposées orthonormées

$$\langle \phi_{\lambda',k'}(t) | \phi_{\lambda,k}(t) \rangle = \delta_{\lambda',\lambda} \delta_{k',k}. \quad (3.23)$$

En vertu de l'hermiticité de $I(t)$, les valeurs propres λ sont réelles et indépendantes du temps, en effet, la dérivée par rapport au temps de l'équation (3.22) donne

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle, \quad (3.24)$$

multiplions ensuite à gauche par $\langle \phi_{\lambda,k'} |$, on aura

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \phi_{\lambda,k}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \phi_{\lambda,k'}(t) \rangle. \quad (3.25)$$

La valeur moyenne de (3.20) dans les états s'écrit

$$i\hbar \langle \phi_{\lambda',k'}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \phi_{\lambda,k}(t) \rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \phi_{\lambda',k'}(t) | H | \phi_{\lambda,k}(t) \rangle = 0, \quad (3.26)$$

qui implique que pour $\lambda' = \lambda$

$$\langle \phi_{\lambda,k}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \phi_{\lambda,k'}(t) \rangle = 0, \quad (3.27)$$

d'où on déduit que les valeurs propres sont constantes (indépendantes du temps).

Le fait que les valeurs propres λ sont constantes permet de faire le lien entre les états propres de $I(t)$ et les solutions de l'équation de Schrödinger, en effet l'équation (3.24) multiplié à gauche par $\langle \phi_{\lambda',k'}(t) |$ donne

$$(\lambda - \lambda') \langle \phi_{\lambda',k'}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_{\lambda,k}(t) \rangle = \langle \phi_{\lambda',k'}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \phi_{\lambda,k}(t) \rangle, \quad (3.28)$$

qui, pour $\lambda' \neq \lambda$, permet d'écrire l'équation (3.26) sous la forme suivante

$$i\hbar \langle \phi_{\lambda',k'} | \frac{\partial}{\partial t} | \phi_{\lambda,k} \rangle = \langle \phi_{\lambda',k'} | H | \phi_{\lambda,k} \rangle. \quad (3.29)$$

On aurait pu déduire immédiatement que les fonctions propres $|\phi_{\lambda,k}(t)\rangle$ sont des solutions de l'équation de Schrödinger si $\lambda = \lambda'$. Cela pourrait être le cas si on utilisera le fait que les phases des états stationnaires ne sont pas fixées. En effet, on peut donc très bien multiplier $|\phi_{\lambda,k}(t)\rangle$ par un facteur de phase dépendant du temps :

$$|\phi_{\lambda,k}(t)\rangle_{\alpha} \equiv \exp[i\alpha_{\lambda k}(t)] |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle, \quad (3.30)$$

où $\alpha_{\lambda k}(t)$ est une fonction réelle du temps arbitrairement choisie. Ces $|\phi_{\lambda,k}(t)\rangle_{\alpha}$ sont aussi des états propres orthonormés de $I(t)$ associés aux valeurs propres λ . Si on choisit bien les phases

$\alpha_{\lambda k}(t)$, l'équation (3.29) sera vérifiée pour $\lambda = \lambda'$ et donc l'objectif sera atteint. Il faut juste avoir le choix des phase $\alpha_{\lambda k}(t)$ tel que

$$\hbar \delta_{kk'} \frac{d\alpha_{\lambda k}}{dt} = \langle \phi_{\lambda, k'}(t) | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \phi_{\lambda, k}(t) \rangle. \quad (3.31)$$

Ce choix montre que l'équation (3.29) pour $|\varphi_{\lambda, k}\rangle_\alpha$ est vérifiée pour $\lambda = \lambda'$ et les élément non diagonaux $\langle \phi_{\lambda, k'}(t) | (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) | \phi_{\lambda, k}(t) \rangle$ sont identiquement nuls. Pour $k = k'$, la phase $\alpha_{\lambda k}(t)$ vérifie l'équation :

$$\hbar \frac{d\alpha_{\lambda k}}{dt} = \langle \phi_{\lambda, k}(t) | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \phi_{\lambda, k}(t) \rangle. \quad (3.32)$$

La solution de l'équation de Schrödinger s'écrit comme une combinaison linéaire des états propres

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k}(0) \exp [i\alpha_{\lambda k}(t)] |\phi_{\lambda, k}(t)\rangle. \quad (3.33)$$

3.2.2 Application : Oscillateur Harmonique dans un champ linéaire dépendant du temps

Considérons l'Hamiltonien (1.38)

$$H(t) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} q^2 - f(t)q \quad (3.34)$$

L'idée est d'introduire une transformation unitaire

$$V = \exp \left(\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t q_c(t') f(t') dt' \right) \exp \left(-\frac{i}{2\hbar} q_c p_c \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} p_c q \right) \exp \left(-\frac{i}{\hbar} q_c p \right)$$

que l'on fait agir sur l'équation de Schrödinger (3.1) pour obtenir l'Hamiltonien transformé

$$H_0 = V^{-1} H V - i\hbar V^{-1} \dot{V}$$

où

$$q_c(t) = \frac{\lambda \cos(\omega t + \phi)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}, \quad \dot{q}_c = -\frac{\lambda \omega \sin(\omega t + \phi)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (3.35)$$

Un calcul simple qui revient tout au long de cette thèse montre que H_0 n'est rien d'autre que l'oscillateur harmonique usuel

$$H_0 = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} q^2 \quad (3.36)$$

qui est un invariant car il indépendant du temps. La transformation inverse sur H_0 , c'est à dire VH_0V^{-1} , permet de définir l'invariant de notre système, en effet

$$I = VH_0V^{-1} = \frac{(p - p_c)^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(q - q_c)^2$$

vérifie l'équation de Liouville-Von Neuman [13]

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} = \left[H = I + i\hbar \frac{\partial V}{\partial t} V^{-1}, I \right]$$

La résolution de l'équation aux valeurs propres de $I(t)$

$$I(t) |\phi_n(t)\rangle = \lambda_n |\phi_n(t)\rangle, \quad (3.37)$$

conduit à

$$\phi_n(x, t) = \left[\frac{\sqrt{m\omega_0}}{n!2^n\sqrt{\pi\hbar}} \right]^{\frac{1}{2}} V \left(\exp \left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar} q^2 \right] H_n \left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} q \right] \right). \quad (3.38)$$

H_n étant les polynômes d'Hermite d'ordre n . Les valeurs propres λ_n sont données par

$$\lambda_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.39)$$

un calcul direct montre que la phase $\alpha_n(t)$ (3.32)s'écrit

$$\alpha_n(t) = - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_0 (t - t_0) + \alpha_n(t_0). \quad (3.40)$$

D'où l'évolué $\psi_n(x, t)$, solution de l'équation de Schrödinger, est

$$\psi_n(q, t) = \left[\frac{1}{n!2^n\rho\sqrt{\pi\hbar}} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-i \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega_0 t \right] V \left(\exp \left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar} q^2 \right] H_n \left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} q \right] \right) \quad (3.41)$$

où on a supposé que les conditions initiales $\alpha_n(t_0) = 0$ et $t_0 = 0$.

3.3 Evolutions périodiques et théorie de Floquet

3.3.1 La méthode de Floquet :

Les évolutions régies par des Hamiltoniens périodiques

$$H(t + T) = H(t). \quad (3.42)$$

relèvent, elles aussi, de l'approche des invariants (ou de Lewis et Riesenfeld). En effet la décomposition de Floquet de l'opérateur d'évolution [19, 20, 21, 22, 23]

$$U(t) = Z(t) e^{iMt}, \quad Z(t+T) = Z(t), \quad Z(T) = Z(0) = 1, \quad (3.43)$$

montre que les états

$$|\phi_j(t)\rangle = Z(t) |\phi_j(0)\rangle,$$

sont des états propres de l'opérateur invariant

$$I(t) = Z(t) M Z^+(t), \quad (3.44)$$

où $|\phi_j(0)\rangle$, à l'instant $t = 0$, est état propre de l'opérateur Hermitique M .

$$I(t) |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle = \lambda |\phi_{\lambda,k}(t)\rangle. \quad (3.45)$$

A partir de l'équation (1.31), on déduit l'Hamiltonien du système sous la forme suivante :

$$H = i \hbar \dot{Z} Z^+ - \hbar Z(t) M Z^+(t). \quad (3.46)$$

3.3.2 Application : Oscillateur Harmonique dans un champ linéaire périodique dépendant du temps

Nous considérons d'abord un oscillateur harmonique interagissant avec un laser en mode unique de fréquence angulaire ω . Dans une approche semi-classique où le champ électrique est écrit $f(t) = \lambda \cos(\omega t + \varphi)$, est donné par (1.38)

$$H(t) = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 - f(t)x \quad (3.47)$$

où $f(t) = \lambda \cos(\omega t + \phi)$, (λ, ϕ) des paramètres constants. L'équation de Schrödinger associée s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \left(\frac{1}{2m} p^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 - f(t)x \right) |\psi(t)\rangle. \quad (3.48)$$

Ce système a été résolu exactement par plusieurs auteurs [24], c'est à dire, en shiftant la coordonnée $x \rightarrow y = x - \mathcal{X}$. Ici Nous allons utiliser une autre approche qui nous sera utile au Chapitre 6 dans le cas de la \mathcal{PT} Pseudo symétrie.

Introduisons une transformation unitaire $D(t)$ dépendante du temps

$$|\psi(t)\rangle = D(t) |\chi(t)\rangle \quad (3.49)$$

qui transforme l'équation de Schrödinger (3.48) en

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle &= h(t) |\chi(t)\rangle \\ \text{avec } h(t) &= D^{-1}(t)H(t)D(t) - i\hbar D^{-1}(t) \frac{\partial}{\partial t} D(t). \end{aligned} \quad (3.50)$$

On choisira les opérateurs dépendant du temps $D(t)$ de sorte que le nouveau Hamiltonien $h(t)$ a forme simple et résolvable, nous pouvons choisir

$$D(t) = e^{\frac{i}{\hbar}(x\mathcal{P}_c(t) - p\mathcal{X}_c(t))} = e^{-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{X}_c(t)\mathcal{P}_c(t)} e^{\frac{i}{\hbar}x\mathcal{P}_c(t)} e^{-\frac{i}{\hbar}p\mathcal{X}_c(t)} \quad (3.51)$$

et son Hermitique conjugué est donné par

$$D^+(t) = e^{+\frac{i}{2\hbar}\mathcal{X}_c(t)\mathcal{P}_c(t)} e^{\frac{i}{\hbar}p\mathcal{X}_c(t)} e^{-\frac{i}{\hbar}x\mathcal{P}_c(t)} \quad (3.52)$$

où les paramètres

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_c(t) &= x_c(t) - x_c(0), \\ \mathcal{P}_c(t) &= p_c(t) - p_c(0) \end{aligned} \quad (3.53)$$

sont reliés aux solutions classiques $x_c(t)$ et $p_c(t)$ du système gouverné par les équations du mouvement classiques

$$\begin{aligned} \dot{x}_c &= \frac{1}{m}p_c \\ \dot{p}_c &= -m\omega_0^2 x_c + f(t) \\ \ddot{x}_c + m\omega_0^2 x_c &= f(t) \end{aligned} \quad (3.54)$$

associées l'Hamiltonien équivalent classique de $H(t)$. Les solutions classiques seront de la forme

$$x_c(t) = \frac{\lambda \cos(\omega t + \phi)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}, \quad \dot{x}_c = -\frac{\lambda \omega \sin(\omega t + \phi)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (3.55)$$

où $x_c(0), p_c(0)$ sont les conditions initiales classiques.

Il est facile de montrer que l'action de la transformation unitaire $D(t)$ sur les opérateurs canoniques conjugués donne

$$\begin{aligned} D^+(t)x D(t) &= x + \mathcal{X}_c(t) \\ D^+(t)p D(t) &= p + \mathcal{P}_c(t). \end{aligned} \quad (3.56)$$

et que son action sur une fonction d'onde est déterminée par

$$D(t)G(x) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}\mathcal{X}_c(t)\mathcal{P}_c(t)\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}x\mathcal{P}_c(t)\right] G(x - \mathcal{X}_c(t)). \quad (3.57)$$

La substitution de l'équation (3.56) dans l'équation (3.50) montre que

$$h(t) = h_d^{OQL} + h_f^{OC}(t) + \frac{1}{2}(\dot{p}_c x_c - p_c \dot{x}_c) + \frac{1}{2}(\dot{p}_c x_c(0) - p_c(0)\dot{x}_c) \quad (3.58)$$

où

$$h_d^{OQL} = \frac{1}{2m}(p - p_c(0))^2 + \frac{m\omega_0^2}{2}(x - x_c(0))^2 \quad (3.59)$$

représente l'oscillateur quantique déplacé indépendant du temps et

$$h_f^{OC}(t) = \frac{1}{2m}(p_c)^2 + \frac{m\omega_0^2}{2}(x_c)^2 - f(t)x_c. \quad (3.60)$$

n'est rien d'autre que l'Hamiltonien classique d'un oscillateur dans un potentiel linéaire dépendant du temps. Remarquons que l'Hamiltonien transformé $h(t)$ (3.58) s'écrit comme

$$h(t) = h_d^{OQL} + \mathcal{L}(t), \quad (3.61)$$

où la fonction "lagrangien classique"

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(t) &= h_f^{OC}(t) + \frac{1}{2}(\dot{p}_c x_c - p_c \dot{x}_c) + \frac{1}{2}(\dot{p}_c x_c(0) - p_c(0)\dot{x}_c) \\ &= \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos 2(\omega t + \phi) + \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \omega^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \cos \omega t \end{aligned} \quad (3.62)$$

peut être éliminée de l'Hamiltonien (3.61) en effectuant la transformation

$$|\chi(t)\rangle = \exp\left[-i \int_0^t dt' \left(\frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} + \mathcal{L}(t')\right)\right] |\phi(t)\rangle. \quad (3.63)$$

Ainsi, l'équation de Schrödinger associée à $h(t)$ se réduit à une équation connue d'un oscillateur harmonique déplacé indépendant du temps

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle &= \left(h_d^{OQL} + \frac{1}{4m} \frac{\lambda^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) |\phi(t)\rangle \\ &= M |\phi(t)\rangle = \mathcal{E}_n |\phi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (3.64)$$

dont les quasi-énergies sont

$$\mathcal{E}_n = \omega_0 \hbar (n + 1/2) + \frac{1}{4m} \frac{\lambda^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (3.65)$$

Maintenant il nous reste à dériver l'opérateur d'évolution associé à Hamiltonien $H(t)$. La solution $|\psi(t)\rangle$ de l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien Hermitique $H(t)$ s'écrit

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left[-i \int_0^t dt' \left(\mathcal{L}(t') - \frac{1}{4m} \frac{\lambda^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) \right] D(t) |\phi(t)\rangle$$

où

$$|\phi(t)\rangle = \exp \left[-i \left(h_d^{OQL} + \frac{1}{4m} \frac{\lambda^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) t \right] |\phi(0)\rangle. \quad (3.66)$$

En utilisant (3.62) et l'évaluation de l'intégrale suivante

$$\int_0^t dt' \mathcal{L}(t') = \frac{1}{4m} \frac{\lambda^2 t}{(\omega_0^2 - \omega^2)} + \frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t,$$

permet d'identifier l'opérateur d'évolution $U(t)$ unitaire associé à l'Hamiltonien périodique Hermitique (3.47)

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp \left[-i \left(\frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t \right) \right] \\ &D(t) \exp \left[-i \left(h_d^{OQL} + \frac{1}{4m} \frac{\lambda^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) t \right] \end{aligned} \quad (3.67)$$

Notez que l'opérateur d'évolution $U(t)$ (3.67) s'écrit comme un produit

$$U(t) = Z(t) e^{-iMt}, \quad (3.68)$$

$Z(t)$ est contraint d'être périodique

$$Z(t) = \exp \left[-i \left(\frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t \right) \right] D(t) \quad (3.69)$$

alors que M est constant et s'écrit

$$M = h_d^{OQL} + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (3.70)$$

Chapitre 4

\mathcal{PT} symétrie et pseudo-Herméiticité

Un des axiomes principaux de la mécanique quantique impose aux observables physiques d'être Hermitiques. Cela principalement dans le but de leur assurer des valeurs propres réelles. En mécanique quantique, l'état d'un système, ses niveaux d'énergie et son évolution dans le temps sont déterminés par un opérateur H appelé Hamiltonien. Cette théorie est bâtie sur un certain nombre d'axiomes fondamentaux, dont la plupart sont imposés par des phénomènes physiques. Par exemple, le fait que le spectre de H , qui représente les niveaux d'énergie du système, doit être réel, est une hypothèse naturelle du point de vue physique. L'évolution de l'état d'un système quantique étant décrite par les solutions $\Psi(x, t) = e^{-\frac{it}{\hbar}H}\Psi_0(x)$ de l'équation de Schrödinger associée au Hamiltonien H , il est également naturel d'imposer à l'opérateur d'évolution $U(t) = e^{-\frac{it}{\hbar}H}$ d'être unitaire, c'est-à-dire $\left|e^{-\frac{it}{\hbar}H}\right|^2 = 1$ pour tout $t \in \mathbb{R}$. En effet, les solutions $\Psi(x, t)$ représentant la densité de probabilité de présence d'une particule quantique au temps t , il est indispensable que leur norme soit préservée dans le temps. Pour ces raisons, les physiciens supposent assez systématiquement que l'opérateur H est auto-adjoint, ce qui garantit ces propriétés.

Mais en 1998, une large classe d'Hamiltoniens s'est révélée posséder des valeurs propres réelles en étant non Hermitiques. Ces Hamiltoniens respectent une condition plus faible pour l'obtention de valeurs propres réelles : la symétrie parité temps (\mathcal{PT}). Selon certains physiciens, il serait donc possible de donner un sens, dans le cadre de la mécanique quantique, à des théories faisant intervenir des opérateurs non-auto-adjoints, pour peu que leur spectre soit réel et leur évolution dans le temps unitaire. Ainsi, depuis quelques années, physiciens et mathématiciens

ont cherché à remplacer la symétrie propre aux opérateurs auto-adjoints par un autre type de symétrie dans l'espace-temps, plus faible, appelée \mathcal{PT} -symétrie.

Ce chapitre consacré à la symétrie aborde des questions ayant donné lieu à une intense activité ces dernières années, à la suite des travaux pionniers de Bender et Boettcher [25, 26, 27] sur les Hamiltoniens non Hermitiques.

L'un des "dogmes" de la théorie quantique est l'association d'un opérateur Hermitique à toute grandeur physique, une propriété qui garantit la réalité des valeurs propres. En réalité, la condition d'Hermiticité est une condition suffisante, nullement nécessaire, puisqu'il existe des opérateurs non Hermitiques dont le spectre est réel. Ainsi, la matrice

$$\begin{pmatrix} 2 & i \\ 2i & -2 \end{pmatrix},$$

qui n'est pas Hermitique, a pour valeurs propres $\pm\sqrt{2}$. L'idée centrale est de remplacer la condition d'hermiticité par une condition plus faible assurant évidemment elle aussi la réalité des valeurs propres. Les spectres des Hamiltoniens non-Hermitiques et ont trouvé qu'ils peuvent produire des spectres entièrement réels. Ceci propose une question importante : est-ce que la théorie quantique conventionnelle est applicable pour des Hamiltoniens non-Hermitiques ? Ou bien il faut construire une nouvelle théorie ?

4.1 \mathcal{PT} -symétrie

L'un des premiers résultats importants fut obtenu dans l'étude d'une famille de Hamiltoniens de la forme :

$$H = p^2 - \lambda(ix)^N \tag{4.1}$$

où λ et N sont des paramètres positifs. Un tel Hamiltonien est visiblement non-Hermitique, puisque $H \neq H^\dagger$ si N n'est pas un entier pair. Par ailleurs, H n'est pas (en général) invariant par la parité \mathcal{P} , qui change p en $-p$ et x en $-x$ - sauf si $N = 4k+2$, $k \in \mathbb{N}$, ni par renversement du temps \mathcal{T} qui change p en $-p$, laisse x inchangé mais complexe conjugué. En revanche, comme Bender et Boettcher [25] l'ont réalisé, tous les Hamiltoniens (4.1), sont invariants si on effectue

les deux opérations \mathcal{P} et \mathcal{T} , d'où la terminologie invariance \mathcal{PT} . C'est ce qui les a conduits à proposer de remplacer la condition d'Hermécticité par celle de l'invariance \mathcal{PT} , bien que, pour les Hamiltoniens de la forme (4.1), le spectre n'est réel que si N est supérieur à une certaine valeur $N_c \simeq 1,42207$. La non-suffisance de l'invariance \mathcal{PT} pour la réalité du spectre force à distinguer les régions de l'espace des paramètres (pour (4.1), le seul paramètre est N) selon la réalité ou non du spectre, et récupère la notion de symétrie brisée, cette fois à propos de la symétrie \mathcal{PT} . Par la suite, d'autres Hamiltoniens ont été étudiés et fournissent des exemples où les régions de symétrie non-brisée sont aussi celles où le spectre est réel.

Un Hamiltonien H est dit \mathcal{PT} -Symétrique s'il est invariant par la transformation \mathcal{PT} , c'est-à-dire

$$H = \mathcal{P}\mathcal{T}H\mathcal{P}\mathcal{T}, \quad (4.2)$$

où \mathcal{P} est l'opérateur de parité (ou réflexion d'espace) et \mathcal{T} est l'opérateur renversement du temps commutent entre eux et tel que leurs carrés donnent l'opérateur unité

$$[\mathcal{P}, \mathcal{T}] = 0, \quad (4.3)$$

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{T}^2 = I. \quad (4.4)$$

Ainsi, si un Hamiltonien H est \mathcal{PT} -symétrique, il commute avec l'opérateur \mathcal{PT} ,

$$[H; \mathcal{PT}] = 0, \quad (4.5)$$

La \mathcal{PT} -symétrie est dite non brisée si toutes les fonctions propres de l'Hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique sont en même temps des fonctions propres de l'opérateur \mathcal{PT} . Par contre, s'il existe des fonctions propres de l'Hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique qui ne sont pas des fonctions propres de l'opérateur \mathcal{PT} , elle est dite brisée.

4.1.1 Valeurs propres des Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques

Ainsi, pour construire une théorie quantique à partir des Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques, nous exigeons de plus que la symétrie ne soit pas brisée. Il faut noter cependant que cette

condition n'est pas triviale car il n'existe aucun moyen pour affirmer à priori qu'une telle symétrie d'un Hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique est brisée ou pas. Il faut tout d'abord déterminer les fonctions propres pour en tirer une conclusion. Avec cette condition supplémentaire, on peut démontrer la réalité des valeurs propres d'un Hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique. En effet, soit $\{\psi_n(x), n = 1, 2, \dots\}$, l'ensemble des fonctions propres communes à H et \mathcal{PT} ,

$$H\psi_n = E_n\psi_n, \quad (4.6)$$

et

$$\mathcal{PT}\psi_n = \theta\psi_n, \quad (4.7)$$

avec E_n et θ les valeurs propres correspondantes, qui sont a priori complexes. Comme

$$(\mathcal{PT})^2 = 1, \quad (4.8)$$

il en résulte que

$$|\theta|^2 = 1. \quad (4.9)$$

La relation (4.2) permet d'écrire

$$\begin{aligned} \mathcal{PT}H\mathcal{PT}\psi_n &= E_n^*\theta^*\mathcal{PT}\psi_n \\ &= |\theta|^2 E_n^*\psi_n = E_n^*\psi_n = E_n\psi_n, \end{aligned} \quad (4.10)$$

d'où

$$E_n = E_n^*. \quad (4.11)$$

4.1.2 \mathcal{PT} – produit scalaire

La question qui se pose maintenant est de savoir si les Hamiltoniens possédant une \mathcal{PT} -symétrie non brisée peuvent décrire la dynamique des systèmes physiques réels. En d'autres

termes il faut vérifier que la norme d'un vecteur propre de H dans l'espace de Hilbert doit être positive et que l'évolution au cours du temps des états propres demeure unitaire. Bien entendu, ces deux exigences sont satisfaites avec des Hamiltoniens Hermitiques. La première permet d'interpréter la norme d'un état comme une probabilité, qui doit être défini positive, alors que la deuxième condition garantie justement l'indépendance de cette probabilité par rapport au temps.

A cet effet, Bender et Boettcher [25] ont défini un \mathcal{PT} -produit scalaire

$$(f, g) = \int_C dx [\mathcal{PT} f(x)] g(x), \quad (4.12)$$

associé aux Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétrique et où

$$\mathcal{PT} f(x) = f^*(-x). \quad (4.13)$$

L'avantage de cette définition du produit scalaire est que, comme en mécanique quantique ordinaire, la norme de toute fonction d'onde est une quantité indépendante de sa phase globale et de plus elle est conservée dans le temps. Cependant, cette définition contient un inconvénient majeur qui réside dans le fait que les normes de certains états propres d'Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques sont négatives.

Désignons par ψ_n et ψ_m les fonctions propres de H orthogonales pour $n \neq m$

$$\langle \psi_m, \psi_n \rangle_{\mathcal{PT}} = \int dx [\mathcal{PT} \psi_m(x)] \psi_n(x) \quad (4.14)$$

$$= \int dx \psi_m^*(-x) \psi_n(x) = (-1)^n \delta_{mn} \quad (4.15)$$

Si $n = m$,

$$\langle \psi_m, \psi_n \rangle_{\mathcal{PT}} = (-1)^m. \quad (4.16)$$

La relation de fermeture s'écrit comme

$$\sum_{n=\hat{a}}^{\infty} (-1)^n \psi_n(x) \psi_n(y) = 1, \quad (4.17)$$

il est clair que la norme n'est pas toujours positive. Contrairement à ce qui est admis en mécanique quantique, usuelle. Par conséquent ces normes ne peuvent pas être interprétés comme des probabilités. Ce qui plus tard, a incité Bender et al à montrer que tous les Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques dont la symétrie n'est pas brisée possèdent une autre symétrie cachée, engendrée par un nouveau opérateur dénoté \mathcal{C} , appelé opérateur de conjugaison de charge. Les propriétés de l'opérateur \mathcal{C} sont presque identiques à ceux de l'opérateur de la conjugaison de charge mais son action est différente de celle de l'opérateur \mathcal{C} de la mécanique quantique qui transforme tous les nombres quantiques additifs en leurs opposés. Ces nombres comprennent la charge électrique, le nombre leptonique (électronique, muonique, tauonique), l'isospin, l'hypercharge, l'étrangeté, la couleur, le nombre baryonique.

4.1.3 L'opérateur \mathcal{C} et le \mathcal{CPT} produit scalaire

Pour résoudre le problème de la norme négative, Bender et al [26, 27] ont montré que tous les Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétrique dont la symétrie n'est pas brisée possèdent une autre symétrie engendrée par un nouvel opérateur linéaire noté \mathcal{C} qui commute avec H et \mathcal{PT} .

$$[\mathcal{C}, H] = [\mathcal{C}, \mathcal{PT}] = 0, \quad (4.18)$$

et par conséquent H commute avec le produit \mathcal{CPT} , $[H, \mathcal{CPT}] = 0$. On montre alors que les fonctions propres communes à H et \mathcal{CPT} sont toutes de normes définies positives. Une fois l'opérateur \mathcal{C} déterminé, il sera possible donc de construire une nouvelle théorie quantique qui satisfait à toutes les contraintes requises.

L'opérateur \mathcal{C} est représenté dans l'espace des coordonnées par

$$\mathcal{C}(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x)\psi_n(y), \quad (4.19)$$

par conséquent,

$$\int dx \mathcal{C}(x, y)\mathcal{C}(y, z) = \delta(x - z), \quad (4.20)$$

et son carré est égal à l'identité

$$\mathcal{C}^2 = 1. \quad (4.21)$$

d'où les valeurs propres de l'opérateur \mathcal{C} sont ± 1 . L'action de \mathcal{C} sur les fonctions propres $\psi_n(x)$ est donnée par

$$\begin{aligned}\mathcal{C}\psi_n(x) &= \int dy C(x, y)\phi_n(y) \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m(x) \int dy \psi_m(y)\psi_n(y) = (-1)^n \psi_n(x).\end{aligned}\quad (4.22)$$

Ainsi, cet opérateur est bien défini en fonction des états propres \mathcal{PT} -symétriques de l'Hamiltonien, autrement dit, \mathcal{C} est une fonction de H .

Nous pouvons également construire l'opérateur de parité \mathcal{P} en termes fonctions propres. Dans l'espace des coordonnées

$$\mathcal{P}(x, y) = \sum_n (-1)^n \psi_n(x)\psi_n(-y) = \delta(x + y).\quad (4.23)$$

Comme l'opérateur \mathcal{C} , le carré de l'opérateur de parité est également égal à l'unité. Malgré que, $\mathcal{P}^2 = 1$ et $\mathcal{C}^2 = 1$, les deux opérateurs ne sont pas identiques; \mathcal{P} est un opérateur réel mais \mathcal{C} est un opérateur complexe. De plus, ces deux opérateurs ne commutent pas et par conséquent

$$[\mathcal{C}, \mathcal{P}] \neq 0; [\mathcal{C}, \mathcal{T}] \neq 0,\quad (4.24)$$

évidemment, \mathcal{C} commute avec le produit \mathcal{PT} .

Enfin, ayant obtenu l'opérateur \mathcal{C} nous définissons une nouvelle structure de produit scalaire, ou le \mathcal{CPT} -produit scalaire

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle_{\mathcal{CPT}} = \int dx [\mathcal{CPT}\phi_m(x)]\phi_n(x).\quad (4.25)$$

Comme,

$$\mathcal{CPT}\phi_m(x) = \int dy \mathcal{CPT}\phi_m^*(x)(-y),\quad (4.26)$$

on écrit

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle_{\mathcal{CPT}} = \int dx [\mathcal{CPT}\phi_m(x)]\phi_n(x) = \delta_{mn}.\quad (4.27)$$

Le \mathcal{CPT} -produit scalaire est défini positif, et les fonctions propres de H sont orthogonales. Etant donné que \mathcal{C} est une fonction de H , il est un opérateur spécifique qui dépend particulièrement du système étudié, contrairement, aux opérateurs P et T .

4.1.4 Applications

1-Etude du système à deux niveaux « Brachistochrone » : cas \mathcal{PT} -symétrique

Le brachistochrone est l'un des problèmes les plus adaptés à l'étude des systèmes \mathcal{PT} -symétrique et est décrit par l'Hamiltonien

$$H = \begin{pmatrix} re^{i\theta} & s \\ s & re^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (4.28)$$

(les paramètres r, s et θ sont réels). \mathcal{T} est l'opérateur complexe conjugué et $\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. En effectuant le produit des matrices, on trouve que : $H = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT})^{-1}$.

Les valeurs propres ε_{\pm} de H sont :

$$\varepsilon_{\pm} = r \cos \theta \pm \sqrt{s^2 - r^2 \sin^2 \theta}. \quad (4.29)$$

La symétrie \mathcal{PT} est *brisée* quand les valeurs propres ne sont pas réelles, soit dans la région $s^2 < r^2 \sin^2 \theta$ les valeurs propres ne sont pas réelles donc la \mathcal{PT} -Symétrie est *brisée*. Dans la région où $s^2 > r^2 \sin^2 \theta$ les valeurs propres sont réelles donc la \mathcal{PT} -Symétrie est *non brisée*. Si on pose $\sin \alpha = \frac{r}{\sin \theta}$, les valeurs propres s'écrivent : $\varepsilon_{\pm} = r \cos \theta \pm s \cos \alpha$, et les vecteurs propres de H s'obtiennent facilement ; on trouve :

$$|+\rangle = C_+ \begin{pmatrix} e^{\frac{i\alpha}{2}} \\ e^{-\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

$$|-\rangle = C_- \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} \\ -e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

où les constantes C_{\pm} sont pour l'instant quelconques. On a :

$$\mathcal{PT} |+\rangle = C_+^* \begin{pmatrix} e^{\frac{i\alpha}{2}} \\ e^{-\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}, \quad (4.32)$$

est donc vecteur propre de \mathcal{PT} avec la valeur propre $+1$ ssi $C_+^* = +C_+$. Le même calcul avec $|-\rangle$ donne $C_-^* = -C_-$ pour avoir $\mathcal{PT} |-\rangle = |-\rangle$.

Avec le produit scalaire habituel, on a :

$$\langle + | - \rangle = -2iC_+^* C_- \sin \alpha \neq 0, \quad (4.33)$$

et

$$\langle + | + \rangle = \frac{1}{\cos \alpha} \neq 1, \quad (4.34)$$

Quand on a choisi $C_+ \in \mathcal{R}$, puisque $\mathcal{PT} |+\rangle = |+\rangle$ le produit scalaire défini dans le texte ou \mathcal{PT} -produit scalaire donne :

$$\langle + | - \rangle_{\mathcal{PT}} = 0.$$

Le carré de la norme au sens de ce \mathcal{PT} produit scalaire est ainsi :

$$\langle + | + \rangle_{\mathcal{PT}} = 2C_+^2 \cos \alpha, \quad (4.35)$$

pour préserver $\mathcal{PT} |+\rangle = |+\rangle$, il faut $C_+ \in \mathcal{R}$, d'où $C_+ = (2 \cos \alpha)^{-1/2}$, à un signe près inessential. De même $\langle - | - \rangle_{\mathcal{PT}} = 2C_-^2 \cos \alpha$; pour avoir $C_-^* = -C_-$, il faut prendre $C_- = i(2 \cos \alpha)^{-1/2}$. D'où les vecteurs propres normalisés de H qui sont également propres de \mathcal{PT} avec la valeur propre $+1$ (donc \mathcal{PT} invariants) :

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cos \alpha}} \begin{pmatrix} e^{\frac{i\alpha}{2}} \\ e^{-\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}, \quad (4.36)$$

$$|-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2 \cos \alpha}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} \\ -e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

Noter que le carré de la norme de $|-\rangle$ vaut -1 : le produit scalaire ainsi défini n'est pas positif.

Donc, il faut redéfinir le produit scalaire.

Soit l'opérateur ("de charge") \mathcal{C} :

$$\mathcal{C} = \frac{1}{\cos \alpha} \begin{pmatrix} i \sin \alpha & 1 \\ 1 & -i \sin \alpha \end{pmatrix}, \quad (4.38)$$

On montre que :

$$[H, \mathcal{C}] = 0 \quad \text{et} \quad \mathcal{C}^2 = 1. \quad (4.39)$$

Comme $\mathcal{PT} |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle$, on a donc maintenant $\mathcal{CPT} |\pm\rangle = |\pm\rangle$, par conséquent :

$$\langle \pm | \pm \rangle_{\mathcal{CPT}} = 1 \quad \text{et} \quad \langle \pm | \mp \rangle_{\mathcal{CPT}} = 0. \quad (4.40)$$

2-Oscillateur Harmonique dans un champ linéaire imaginaire : Cas \mathcal{PT} symétrique

Considérons l'Hamiltonien (1.38)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - ifx, \quad (4.41)$$

où $f = \lambda$ est réel.

On a

$$\begin{cases} \mathcal{P} : p \rightarrow -p, x \rightarrow -x \\ \mathcal{T} : p \rightarrow -p, x \rightarrow x, i \rightarrow -i \end{cases}, \quad (4.42)$$

et

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}^{-1}, \quad \mathcal{T} = \mathcal{T}^{-1}. \quad (4.43)$$

En utilisant les propriétés (4.42) des opérateurs \mathcal{P} et \mathcal{T} , nous constatons que H est \mathcal{PT} -symétrique, c'est à dire qu'il commute avec \mathcal{PT} , en effet $[H, \mathcal{PT}] = 0$. Montrons que le spectre d'énergie de cet Hamiltonien est réel. Partons de l'équation de Schrödinger stationnaire de cet Hamiltonien s'écrit

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (4.44)$$

où $E_n, |\phi_n\rangle$ sont respectivement les spectres d'énergies et les fonctions propres de l'Hamiltonien H . Effectuons sur (4.44) la transformation non unitaire

$$|\phi_n\rangle = D |\psi_n\rangle \quad \text{où} \quad D = \exp\left(\frac{\lambda}{\hbar m \omega_0^2} p\right), \quad (4.45)$$

l'équation (4.44) se transforme comme suit

$$h |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \quad \text{avec} \quad h = D^{-1}hD = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{\lambda^2}{2\hbar m\omega_0^2} \quad (4.46)$$

nous déduisons que les valeurs propre E_n sont réelles et données par

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda^2}{2m\omega_0^2},$$

et les vecteurs propres associés sont

$$\phi_n(x, t) = \left[\frac{\sqrt{m\omega_0}}{n! 2^n \sqrt{\pi \hbar}} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\exp \left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2 + \frac{\lambda}{m\omega_0^2} p \right] H_n \left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x \right] \right). \quad (4.47)$$

Clairement, ceux-ci ne sont pas orthonormés tels qu'ils sont ; ils sont plutôt orthonormés par rapport au \mathcal{CPT} produit scalaire

$$\begin{aligned} \langle \phi_m, \phi_n \rangle_{\mathcal{CPT}} &= \int dx [\mathcal{CPT} \phi_m(x)] \phi_n(x) = \\ &= \int dx [\phi_m^*(x) \exp \left[-\frac{2\lambda}{m\omega_0^2} p \right]] \phi_n(x) = \delta_{mn}. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Une méthode systématique de construction de \mathcal{C} dans la théorie des perturbations a été développée [26, 27] , ce qui nous a grandement facilité la tâche par l'introduction de l'opérateur défini par $\mathcal{PC} = \exp \left[-\frac{2\lambda}{m\omega_0^2} p \right]$.

4.2 Pseudo-Herméiticité

Les situations où les Hamiltoniens ne sont pas Hermitiques mais ne décrivent pas non plus des systèmes dissipatifs peuvent être formulés de manière précise et cohérente afin de permettre une évolution temporelle unitaire. La manière la plus efficace et la plus générale est de faire correspondre des Hamiltoniens non Hermitiques à leurs homologues Hermitiques par l'action d'une transformation de similarité.

Ainsi, l'objectif de remplacer la condition mathématique de l'Herméiticité par la condition plus physique de la \mathcal{PT} symétrie peut être placé dans un contexte mathématique plus général connu sous le nom de pseudo-Herméiticité. Un opérateur linéaire A est pseudo Hermitique s'il existe un opérateur Hermitique η tel que

$$A^+ = \eta A \eta^{-1}. \quad (4.49)$$

L'opérateur η est souvent appelé opérateur métrique. La condition dans (4.49) se réduit à l'Hermécticité ordinaire quand l'opérateur métrique η est égal à l'identité I et à la \mathcal{PT} -symétrie quand $\eta = \mathcal{PT}$. Le concept de pseudo-Hermécticité a été introduit dans les années 1940 par Dirac et Pauli [28, 29, 30], et discuté plus tard par Lee, Wick et Sudarshan [31, 32], qui essayaient de résoudre les problèmes qui se posent dans la quantification de l'électrodynamique et dans d'autres théories quantiques des champs où les états de norme négative apparaissent comme une conséquence de la renormalisation.

La notion de quasi-Hermécticité a été discutée en détail en 1992 par Scholtz et al [33]. Cet article approfondi est pertinent pour la \mathcal{PT} symétrie car il a été le premier à montrer comment construire une transformation de similarité qui met en correspondance les opérateurs Hermitiques et les opérateurs quasi-Hermitiques correspondants et aussi les premiers à considérer les transformations correspondantes des produits scalaires de l'espace de Hilbert.

En 2002, Ali Mostafazadah a souligné dans ces trois articles [34, 35, 36], qu'il y'a des Hamiltoniens qui ne sont ni Hermitiques ni \mathcal{PT} symétriques mais possèdent des spectres réels et positifs. Il a montré aussi l'existence d'Hamiltoniens \mathcal{PT} symétrique dont le spectre n'est pas réel. Ce qui l'amener à conclure que la \mathcal{PT} -symétrie n'est pas suffisante ou nécessaire pour garantir la réalité du spectre; par conséquent, il a présenté une alternative à la mécanique quantique conventionnelle, dans laquelle les Hamiltoniens sont pseudo-Hermitiques.

La pseudo-Hermécticité permet de faire passer d'un Hamiltonien Hermitique à un Hamiltonien pseudo-Hermitique équivalent, autrement dit, tout Hamiltonien pseudo-Hermitique possède un Hamiltonien Hermitique équivalent, les deux Hamiltoniens sont reliés par la relation

$$h = \rho H \rho^{-1}, \quad (4.50)$$

où ρ est un opérateur linéaire, inversible et borné connu sous le nom d'opérateur de transformation de Dyson, h et H sont des Hamiltonien Hermitique et pseudo-Hermitique respectivement.

Considérons les équations aux valeurs propres des deux Hamiltoniens

$$h |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle, \quad (4.51)$$

et

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle. \quad (4.52)$$

Cette transformation ρ nous permet de relier les vecteurs propres de l'opérateur non-Hermitique H à ceux de l'opérateur Hermitique h

$$|\phi_n\rangle = \rho^{-1} |\psi_n\rangle. \quad (4.53)$$

Sachant que tout Hamiltonien Hermitique possède un spectre réel, donc de l'équation (4.52) on déduit que le spectre des Hamiltoniens pseudo-Hermitiques est réel.

Les équations de Schrödinger correspondantes sont :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_n\rangle = h |\Psi_n\rangle, \quad (4.54)$$

et

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi_n\rangle = H |\Phi_n\rangle, \quad (4.55)$$

comme h est Hermitique c'est-à-dire $h = h^+$ on a

$$h = \rho H \rho^{-1} \rightarrow h^+ = (\rho^{-1})^+ H^+ \rho^+, \quad (4.56)$$

donc

$$\rho H \rho^{-1} = (\rho^{-1})^+ H^+ \rho^+, \quad (4.57)$$

$$H^+ = \eta H \eta^{-1}, \quad (4.58)$$

avec

$$\eta = \rho^+ \rho, \quad \eta^{-1} = (\rho^+ \rho)^{-1}, \quad (4.59)$$

où η est un opérateur linéaire, Hermitique et inversible. On dit qu'un Hamiltonien est pseudo-Hermitique ou quasi-Hermitique, s'il satisfait la relation (4.58).

4.2.1 Le pseudo produit scalaire

L'Hamiltonien Hermitique h préserve le produit scalaire usuel c'est-à-dire

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{nm}, \quad (4.60)$$

La transformation (4.53) d'exprimer ce produit scalaire en fonction des états propres de l'Hamiltonien pseudo-Hermitiques H , en effet

$$\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \langle \phi_m | \rho^+ \rho | \phi_n \rangle = \langle \phi_m | \eta | \phi_n \rangle \equiv \langle \phi_m | \phi_n \rangle_\eta = \delta_{nm}, \quad (4.61)$$

on constate que le produit scalaire standard n'est pas préservé. Le pseudo produit scalaire (4.61) introduit par Mostafazadah [37, 38, 39] est définit, positif et conserve la norme, c'est à dire préserve l'unitarité de l'évolution. En effet, les équations (4.55) et (4.61) impliquent que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi_m | \Phi_n \rangle_\eta = \langle \Phi_m | \eta H - H^+ \eta | \Phi_n \rangle = 0, \quad (4.62)$$

de ce fait les postulats énoncés au Chapitre 1 sont toujours d'actualité moyennant la notion du pseudo produit scalaire (4.61) et (4.62).

4.2.2 Hamiltoniens pseudo-Hermitiques ayant une base bi-orthonormée complète

Les Hamiltonien pseudo Hermitiques possèdent une base bi-orthonormée

$$\langle \chi_m | \phi_n \rangle = \delta_{nm}, \quad (4.63)$$

où $|\phi_n\rangle$ et $|\chi_n\rangle$ sont les fonctions propres vérifiant les équations aux valeurs propres

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad (4.64)$$

$$H^+ |\chi_n\rangle = E_n |\chi_n\rangle, \quad (4.65)$$

la relation de fermeture est donnée par :

$$\sum_n |\chi_n\rangle \langle \phi_n| = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \chi_n| = 1. \quad (4.66)$$

Dans cette base H et H^+ sont donnés respectivement par :

$$H = \sum_n |\psi_n\rangle E_n \langle \phi_n|, \quad H^+ = \sum_n |\phi_n\rangle E_n \langle \psi_n|. \quad (4.67)$$

En utilisant (4.63) et (4.66), nous notons que la métrique peut être reconstruite à partir des vecteurs propres de l'opérateur non-Hermitique H et son conjugué Hermitique H^+ , dans le cas des valeurs propres non dégénérées on a

$$\eta = \sum_n |\chi_n\rangle \langle \chi_n|, \quad (4.68)$$

et son inverse est

$$\eta^{-1} = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|. \quad (4.69)$$

par contre l'opérateur de transformation de Dyson ρ et son inverse ρ^{-1} sont donnés par

$$\rho = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \chi_n|, \quad \rho^{-1} = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (4.70)$$

Notons que dans le cas des Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques, le rôle de η est joué par \mathcal{PC} [41] :

$$\eta = \mathcal{PC} \quad (4.71)$$

4.2.3 Application :

1-Etude du système à deux niveaux « Brachistochrone » : Cas pseudo-Hermitique

On reprend l'exemple précédent (4.28) dont les valeurs propres sont données par(4.29). L'opérateur métrique $\eta = \rho^+ \rho$ qui par son action transforme H en $H^+ = \eta H \eta^{-1}$ est donné par :

$$\eta = \frac{1}{\cos \alpha} \begin{pmatrix} 1 & -i \sin \alpha \\ i \sin \alpha & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.72)$$

En calculant $\eta^{1/2}$, nous obtenons ρ sous la forme suivante

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{\cos \alpha}} \begin{pmatrix} \sin \frac{\alpha}{2} & -i \cos \frac{\alpha}{2} \\ i \cos \frac{\alpha}{2} & \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix}, \quad (4.73)$$

ainsi nous déduisons facilement à partir (4.50) l'Hamiltonien Hermitique h ,

$$h = \rho H \rho^{-1} = \begin{pmatrix} r \cos \theta & -\frac{\omega}{2} \\ -\frac{\omega}{2} & r \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (4.74)$$

où

$$\omega = 2\sqrt{s^2 - r^2 \sin^2 \theta}. \quad (4.75)$$

Les valeurs propres de h sont donnée par : $\varepsilon_{\pm} = r \cos \alpha \pm s \cos \alpha$.

Les états propres $|\phi_{\pm}\rangle$ de H sont déduits à partir de ceux de h par la relation :

$$|\phi_{\pm}\rangle = \rho^{-1} |\psi_{\pm}\rangle. \quad (4.76)$$

donc

$$|\phi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2 \cos \alpha}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\alpha}{2}} \\ e^{-i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix} \quad (4.77)$$

$$\text{et } |\phi_{-}\rangle = \frac{i}{\sqrt{2 \cos \alpha}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\alpha}{2}} \\ -e^{i\frac{\alpha}{2}} \end{pmatrix}. \quad (4.78)$$

On peut vérifier facilement que :

$$\langle \phi_{\pm} | \eta | \phi_{\pm} \rangle = 1. \quad (4.79)$$

1-Oscillateur Harmonique dans un champ linéaire imaginaire : Cas pseudo-Hermitique

Reprenons toujours l'Hamiltonien (1.38)

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - ifx, \quad H \neq H^+, \quad (4.80)$$

où $f = \lambda$, est réel.

L'équation de Schrödinger stationnaire de ce Hamiltonien s'écrit sous la forme

$$\left[\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - i\lambda x \right] |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle, \quad (4.81)$$

dont $E_n, |\Psi\rangle$ sont respectivement les spectres d'énergies et les fonctions propres de l'Hamiltonien H .

Introduisons l'opérateur η défini par

$$\eta = \exp \left[\frac{2\lambda}{m\omega_0^2} p \right]$$

Nous pouvons facilement vérifier que

$$H^+ = \eta H \eta^{-1}, \quad (4.82)$$

et par conséquent

$$h = \eta^{1/2} H \eta^{-1/2}, \quad (4.83)$$

donne l'équivalent Hermitique

$$h = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 + \frac{\lambda^2}{2\hbar m\omega_0^2}, \quad (4.84)$$

dont les valeurs propres

$$E_n = \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\lambda^2}{2m\omega_0^2},$$

sont réelles et les fonctions propres sont données par

$$|\psi_n(x, t)\rangle = \left[\frac{\sqrt{m\omega_0}}{n! 2^n \sqrt{\pi \hbar}} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\exp \left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2 \right] H_n \left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x \right] \right). \quad (4.85)$$

On en déduit les fonctions propres associées à H par transformation inverse $|\phi_n\rangle = \eta^{-1/2} |\psi_n\rangle$,

$$|\phi_n(x, t)\rangle = \left[\frac{\sqrt{m\omega_0}}{n! 2^n \sqrt{\pi \hbar}} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\exp \left[-\left(\frac{m\omega_0}{2\hbar} x^2 + \frac{\lambda}{m\omega_0^2} p \right) \right] H_n \left[\left(\frac{m\omega_0}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} x \right] \right). \quad (4.86)$$

Clairement, ceux-ci ne sont pas orthonormés tels qu'ils sont ; ils sont plutôt orthonormés par rapport au η produit scalaire

$$\langle \phi_m, \phi_n \rangle_\eta = \int dx [\phi_m^*(x) \exp \left[\frac{2\lambda}{m\omega_0^2} p \right] \phi_n(x)] = \delta_{mn}.$$

Chapitre 5

Les systèmes non Hermitiques dépendants du temps

5.1 Hamiltonien pseudo-Hermitique

L'évolution temporelle des systèmes Hamiltoniens est une question centrale et fondamentale en mécanique quantique, en particulier en ce qui concerne les applications physiques. Les principes clés sont très bien compris depuis longtemps pour les systèmes Hamiltoniens Hermitiques et peuvent être trouvés dans presque n'importe quel livre standard sur la mécanique quantique. Cependant, la situation est assez différente pour la classe de systèmes non Hermitiques qui possèdent des spectres de valeurs propres réels ou au moins partiellement réels. Pour les systèmes indépendants du temps, les principes directeurs sont maintenant bien compris et de nombreuses expériences existent pour confirmer les principales conclusions, par ex. [42, 43, 44]. Pour des revues récentes sur le sujet, voir par exemple [40, 45] ou [46] pour les numéros spéciaux récents.

En revanche, les systèmes non-Hermitiques dépendant du temps sont beaucoup moins étudiés et il semble que jusqu'à présent aucun consensus n'ait été atteint sur un certain nombre de questions centrales. Alors que le traitement des systèmes avec des Hamiltoniens non Hermitiques dépendant du temps avec des opérateurs métriques indépendants du temps [47, 48], est largement accepté, la généralisation aux opérateurs métriques dépendant du temps a soulevé des controverses [37, 38, 39, 45, 49, 50, 51, 52, 53]. Le débat de 2007 [37, 45, 46, 47, 48] et les

résultats qui en découlent [39, 49] révèlent que l'unitarité de l'évolution temporelle peut être garantie mais le Hamiltonien (le générateur de l'évolution temporelle de Schrödinger) doit rester inobservable en général. Les derniers résultats qui ont été récemment illustrés dans [54, 55] font valoir qu'il est incompatible de maintenir une évolution temporelle unitaire pour les Hamiltoniens non-Hermitiques dépendant du temps lorsque l'opérateur métrique dépend explicitement du temps. Nous rappelons brièvement les différents points de vue concernant cette controverse.

Dans la Ref. [37], Mostafazadeh a affirmé qu'à l'aide d'un opérateur métrique dépendant du temps, on ne peut assurer l'unitarité de l'évolution temporelle en même temps que l'observabilité de l'Hamiltonien. Ce point de vue, est adopté par Fring et al [54, 55]. Tandis que, certains auteurs ont recours à une évolution temporelle non-unitaire [37, 38, 39, 51, 52] et insistent sur la relation de quasi-Hermiticité entre un «Hamiltonien» Hermitique et un «Hamiltonien» non Hermitique.

Dans ce chapitre, nous allons évoquer brièvement les systèmes quantiques non Hermitiques dont l'opérateur Hamiltonien $H(t)$ dépend explicitement du temps.

Dans le cas où l'Hamiltonien H est dépendant du temps, il y a deux points de vue différents pour la dépendance du temps de l'opérateur métrique. L'un est celui de Ali Mostafazadeh qui dit que : l'indépendance du temps de l'opérateur métrique est une condition nécessaire pour assurer la pseudo Hermécticité de l'Hamiltonien $H(t)$, et l'autre celui de Milozlav Znojil qui dit que l'indépendance du temps n'est pas une condition nécessaire pour garantir la pseudo-Hermécticité de $H(t)$.

5.1.1 Point de vue d'Ali Mostafazadeh

Nous résumons le point de vue de Mostafazadeh [37, 38, 39]. Soit $U^H(t)$ l'opérateur d'évolution associé à l'Hamiltonien non-Hermitiques $H(t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^H(t) = H(t) U^H(t), U(0) = I, \quad (5.1)$$

et $\psi(t)$ et $\phi(t)$ des vecteurs d'état évoluant sous l'action de $U^H(t)$, par

$$\psi(t) = U^H(t) \psi(0), \quad \phi(t) = U^H(t) \phi(0), \quad (5.2)$$

Le pseudo produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\eta(t)}$ (4.61) valable pour $\eta(t)$ ainsi que l'unitarité de l'évolution confère au produit scalaire $\langle \psi(t), \phi(t) \rangle_{\eta(t)}$ son indépendance par-rapport au temps

$$\begin{aligned} \langle \psi(t), \phi(t) \rangle_{\eta(t)} &= \langle \psi(t) | \eta(t) \phi(t) \rangle \\ &= \langle \psi(t) | U^{+H}(t) \eta(t) U^H(t) | \phi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \eta(0) | \phi(0) \rangle, \end{aligned} \quad (5.3)$$

d'où, on déduit

$$U^{+H}(t) \eta(t) U^H(t) = \eta(0) \Rightarrow \eta(t) = [U^{+H}(t)]^{-1} \eta(0) U^H(t)^{-1} \quad (5.4)$$

qui nous permet d'obtenir

$$\eta(t)^{-1} = U^H(t) \eta(0)^{-1} U(t)^{+H}, \quad (5.5)$$

en utilisant (5.1), la différenciation de (5.5) donne

$$H^+(t) = \eta(t) H(t) \eta(t)^{-1} - i\hbar \eta(t) \frac{\partial}{\partial t} \eta(t)^{-1}. \quad (5.6)$$

L'équation (5.6) montre que $H(t)$ est η -pseudo-Hermitique si et seulement si η est indépendant du temps.

5.1.2 Point de vue de Milozlav Znojil

M. Znojil [49, 50, 56] a affirmé que l'évolution des systèmes quantiques quasi-Hermitiques est générée par un générateur d'évolution non observable H_{gen} différent de H . L'équation de Schrödinger dépendante du temps associée à l'Hamiltonien $h(t)$ équivalente Hermitique de l'Hamiltonien non-Hermitiques $H(t)$ est définie par

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi(t)\rangle = h(t) |\varphi(t)\rangle, \quad |\varphi(t)\rangle = U^h(t) |\varphi(0)\rangle \quad (5.7)$$

qui en terme d'opérateur d'évolution $U^h(t)$ s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^h(t) = h(t) U^h(t) \quad (5.8)$$

où

$$h(t) = \rho(t)H(t)\rho^{-1}(t), \quad (5.9)$$

La solution formelle de l'équation de Schrödinger ci dessus s'écrit alors

$$|\varphi(t)\rangle = U^h(t) |\varphi(0)\rangle, \quad (5.10)$$

et par conséquent elle satisfait à la relation

$$\langle\varphi(t)|\varphi(t)\rangle = \langle\varphi(0)|\varphi(0)\rangle, \quad (5.11)$$

qui montre que la norme reste constante à tout instant.

M Znojil [56] est alors en mesure de faire la distinction entre deux évolutions formelles définies par

$$|\phi(t)\rangle = U_D(t) |\phi(0)\rangle, \quad U_D(t) = \rho^{-1}(t) U^h(t) \rho(0), \quad (5.12)$$

$$\langle\langle\phi(t)| = \langle\langle\phi(0)| U_G(t), \quad U_G(t) = \rho^{-1}(0) U^{+h}(t) \rho(t), \quad (5.13)$$

où les opérateurs $U_D(t)$ et $U_G(t)$ agissent sur le ket $|\phi\rangle = \rho^{-1}(t) |\varphi(t)\rangle$ et le bra $\langle\langle\phi| = \langle\varphi(t)| \rho(t)$ respectivement. Cette convention reflète bien le fait qu'apparaît deux manières différentes de représenter la fonction d'onde (5.10). Un calcul élémentaire conduit à la règle d'évolution de l'action à droite accompagnée de son parallèle action à gauche. Les équations différentielles relatives aux deux opérateurs d'évolution droit $U_D(t)$ et gauche $U_G(t)$ sont donc,

$$i\hbar\partial_t U_D(t) = -i\hbar\rho^{-1}(t) [\partial_t \rho(t)] U_D(t) + H(t) U_D(t), \quad (5.14)$$

et

$$i\hbar\partial_t U_G^+(t) = H^+(t) U_G^+(t) + [i\hbar\partial_t \rho^+(t)] [\rho^{-1}(t)]^+ U_G^+(t). \quad (5.15)$$

Par conséquent les états $|\phi\rangle$ et $|\phi\rangle\rangle$ satisfont séparément aux équations de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = H_{(gen)}(t) |\phi(t)\rangle, \quad (5.16)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle\rangle = H_{(gen)}^+(t) |\phi(t)\rangle\rangle, \quad (5.17)$$

où

$$\begin{aligned} H_{gen}(t) &= H(t) - i\hbar\rho^{-1}(t)\partial_t\rho(t), \\ H_{gen}^+(t) &= H^+(t) + i\hbar\partial_t\rho^+(t)(\rho^{-1})^+(t). \end{aligned} \quad (5.18)$$

Un calcul élémentaire montre que lorsque on effectue la différenciation de la norme $\langle\langle\phi|\phi\rangle\rangle$ par rapport au temps on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\langle\phi|\phi\rangle\rangle = 0 \quad (5.19)$$

qui, de ce point de vue, montre aussi que l'évolution par rapport au temps est unitaire.

Nous constatons que deux points de vue opposés émergent lorsqu'on traite les systèmes quantiques dépendants du temps et quasi-Hermitiques.

5.1.3 Point de vue de Fring et Moussa

Fring et al [54, 55] affirment que les relations de quasi-Herméticité (4.50) et (4.58) ne sont plus valable dans le cas d'une métrique $\eta(t)$ dépendante du temps et par conséquent approuvent le point de vue de Mostafazadah. Comme point de départ, nous prenent les deux équations de Schrödinger dépendantes du temps

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = h(t)|\psi(t)\rangle, \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle = H(t)|\phi(t)\rangle, \quad (5.20)$$

$h(t)$ étant Hermitique alors que $H(t)$ est considéré comme non-Hermitique, c'est-à-dire que, $h(t) = h^+(t)$ et $H(t) \neq H^+(t)$. Ils insistent sur le fait que les opérateurs ne peuvent être appelés Hamiltoniens que s'ils génèrent l'évolution temporelle du système considéré, c'est-à-dire s'ils satisfont aux équations de Schrödinger dépendantes du temps. Ils supposent ensuite que les deux solutions $|\psi(t)\rangle$ et $|\phi(t)\rangle$ sont reliées par un opérateur inversible dépendant du temps $\rho(t)$ comme suit

$$|\psi(t)\rangle = \rho(t)|\phi(t)\rangle \quad (5.21)$$

Il s'ensuit immédiatement par substitution directe de (5.21) dans (5.20) que les deux Hamiltoniens sont reliés l'un à l'autre comme suit

$$h(t) = \rho(t)H(t)\rho^{-1}(t) - i\hbar\rho^{-1}(t)\partial_t\rho(t), \quad (5.22)$$

Ainsi, $h(t)$ et $H(t)$ ne sont plus liés par une transformation de similarité comme dans le scénario complètement indépendant du temps ou le scénario dépendant du temps avec une métrique indépendante du temps. Ils réfèrent l'équation (5.22) comme la relation Dyson dépendante du temps généralisant sa contrepartie indépendante du temps. En prenant le conjugué Hermitique de l'équation (5.22) et en utilisant l'Hermiticité de $h(t)$ nous permettra d'obtenir une relation entre $H(t)$ et son conjugué Hermitique

$$H^+(t)\eta(t) - \eta(t)H(t) = i\hbar\partial_t\eta(t), \quad (5.23)$$

Interprétant $\eta(t) = \rho^+(t)\rho(t)$ en tant qu'opérateur métrique cette relation (5.23) remplace la relation quasi-Hermiticité standard bien connue dans le contexte quantique non-Hermitique indépendant du temps Mécanique [54, 55].

5.2 Hamiltonien pseudo \mathcal{PT} -symétrique

Comme déjà signalé au chapitre 3, il est difficile de résoudre, dans le cas Hermitique, l'équation de Schrödinger dépendante du temps (3.1) de façon exacte. Dans le cas non-Hermitique dépendant du temps, on peut faire appel à la méthode des pseudo invariants [57, 58] ou à la théorie de Floquet pour les systèmes périodiques. Cette dernière méthode fait l'objet de ce paragraphe qui constitue notre contribution originale à ce travail.

Avant d'aborder la théorie de Floquet pour les systèmes non-Hermitiques périodiques, il est utile de rappeler brièvement le nouveau concept de pseudo-parité-temps (pseudo- \mathcal{PT} -symétrie) introduit par Luo et al [59] concernant l'utilisation des modulations biharmoniques dans les systèmes optiques périodiques avec gain et perte équilibrés. Ils ont étudiés les systèmes à deux niveaux modulés périodiquement avec un gain et une perte équilibrés au moyen d'une analyse asymptotique à plusieurs échelles. Dans un premier temps, il a été démontré que le système effectif non modulé dérivé par la méthode d'approximation, c'est à dire de moyenne sur les hautes fréquences, est \mathcal{PT} -symétrique que ce soit le système d'origine est \mathcal{PT} -symétrique ou pas.

Ils considèrent un Hamiltonien non-Hermitique périodique de période τ , $H(t) = H(t + \tau)$ décrit par l'équation de Schrödinger :

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{i\gamma}{2} + \frac{S(t)}{2} & v \\ v & -\frac{i\gamma}{2} - \frac{S(t)}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

v est la force de couplage entre les canaux, γ la force de gain et de perte et $S(t) = -A [\sin \omega t + f \sin(2\omega t + \phi)]$ la modulation biharmonique. $\phi \in [0, 2\pi]$ dénote la phase relative des deux harmoniques. ω est la fréquence et A est l'amplitude, f est un coefficient sans dimension. L'Hamiltonien $H(t)$ pour le système (5.24) est \mathcal{PT} -symétrique lorsque $t \rightarrow -t$ et $\phi = 0$ ou π . Cependant, pour une phase ϕ différente de π ou 0 , la modulation biharmonique brise la \mathcal{PT} -symétrie.

Sous la condition de $v \ll \max \left[\omega, \sqrt{|A|\omega} \right]$ on peut mettre en œuvre l'analyse de Floquet à haute fréquence. En moyennant les termes de haute fréquence, on peut obtenir un système effectivement non modulé dont l'Hamiltonien diagonalisé a des valeurs propres ou quasi-énergies : $\varepsilon_{\pm} = \pm |J| \sqrt{1 - [\gamma/2J]^2}$, indépendants du temps. La force de couplage redimensionnée J dépend des valeurs de f/ω .

ces deux remarques nous ont inspiré : i) cette méthode n'est pas réversible c'est à dire qu'on ne pourra pas revenir à notre système initial. ii) le renversement du temps en mécanique quantique est intimement lié à la conjugaison complexe. Puisque t est un paramètre en mécanique quantique, l'opérateur \mathcal{T} ne peut agir sur t dans l'Hamiltonien.

Ce qui nous a inspiré à utiliser la théorie de Floquet [19] et ainsi obtenir l'Hamiltonien de Floquet indépendant du temps où la \mathcal{PT} -symétrie définie au chapitre 4 est facilement applicable.

5.2.1 La théorie de Floquet pour les systèmes pseudo \mathcal{PT} -symétrique

L'équation de Schrödinger régit l'Hamiltonien périodique non-Hermitique $H(t) = H(t + \tau)$ est donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = H(t) |\Phi(t)\rangle, \quad (5.25)$$

où $\tau = 2\pi/\omega$ est la période de l'évolution. L'équation différentielle pour l'opérateur d'évolution non unitaire $U(t)$ dans l'intervalle $[0, t]$ satisfait à

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H(t)U(t), \quad (5.26)$$

tel que $U(0) = 1$. La dynamique associée à l'équation (5.26) est non-unitaire en général. La décomposition de Floquet de l'opérateur d'évolution [53, 60, 61] est

$$U(t) = Z(t)e^{-iMt}, \quad (5.27)$$

où $Z(t)$ est un opérateur périodique non unitaire tel que $Z(0) = Z(\tau) = 1$, M est un opérateur non-Hermitique indépendant du temps. La transformation non-unitaire

$$|\Phi(t)\rangle = Z(t) |\psi(t)\rangle = U(t)e^{iMt} |\psi(t)\rangle. \quad (5.28)$$

conduit à une équation de Schrödinger gouverné par l'Hamiltonien non-Hermitique M indépendant du temps

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = M |\psi(t)\rangle, \quad (5.29)$$

qui constitue un résultat intéressant qui nous permettra d'étudier la \mathcal{PT} -symétrie où l'opérateur renversement du temps \mathcal{T} est cette fois-ci lié à la conjugaison complexe, contrairement à ce qui a été adopté par Luo et al [59].

L'Hamiltonien M est dit \mathcal{PT} -Symétrique s'il est invariant par la transformation \mathcal{PT} , c'est-à-dire

$$M = \mathcal{PT}M\mathcal{PT}, \quad (5.30)$$

Ainsi, si l'Hamiltonien M est \mathcal{PT} -symétrique, il commute nécessairement avec l'opérateur \mathcal{PT} ,

$$[M, \mathcal{PT}] = 0. \quad (5.31)$$

La \mathcal{PT} -symétrie est dite non brisée si toutes les fonctions propres de l'Hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique M sont en même temps des fonctions propres de l'opérateur \mathcal{PT} . Par contre, s'il existe des fonctions propres de l'Hamiltonien \mathcal{PT} -symétrique M qui ne sont pas des fonctions propres de l'opérateur \mathcal{PT} , elle est dite brisée.

Nous avons exigé jusqu'à présent que la symétrie ne soit pas brisée pour construire une théorie quantique à partir des Hamiltoniens \mathcal{PT} -symétriques. Il faut cependant noter qu'il existe des Hamiltoniens non \mathcal{PT} -symétrique dont les spectres sont réels, cette symétrie induite est appelée «pseudo- \mathcal{PT} – symétrie» qui constitue le fil directeur de notre travail. L'opérateur M joue un rôle très important dans l'étude de la notion de la \mathcal{PT} (ou pseudo \mathcal{PT})-symétrie d'où la décomposition de Floquet (5.27) est fortement liée à la stabilité dynamique du système et dépend de la nature \mathcal{PT} -symétrique de l'opérateur M (brisée ou non brisée). L'action de l'opérateur de Floquet $U(\tau) = e^{-iM\tau}$ au bout d'une période τ sur les états propres $|\phi_n(0)\rangle$ de M donne

$$e^{-iM\tau} |\phi_n(0)\rangle = |\phi_n(\tau)\rangle = e^{-i\epsilon_n\tau} |\phi_n(0)\rangle, \quad (5.32)$$

où ϵ_n sont les quasi-énergies. L'évolution à tout instant est donnée par

$$e^{-iMt} |\phi_n(0)\rangle = |\phi_n(t)\rangle = e^{-i\epsilon_n t} |\phi_n(0)\rangle. \quad (5.33)$$

Définissons les fonctions de Floquet τ -périodique, c'est-à-dire $|\phi_n(t)\rangle = |\phi_n(t + \tau)\rangle$, comme suit

$$|\phi_n(t)\rangle = Z(t) |\phi_n(0)\rangle. \quad (5.34)$$

Les états de Floquet sont reliés aux fonctions de Floquet à l'aide d'un facteur de phase

$$|\Phi_n(t)\rangle = e^{-i\epsilon_n t} |\phi_n(t)\rangle, \quad (5.35)$$

Notons que ces états $|\Phi_n(t)\rangle$, sont des solutions de l'équation de Schrödinger dépendante du temps (5.25). En substituant (5.35) dans l'équation (5.25), nous obtenons l'équation aux valeurs propres

$$K(t) |\phi_n(t)\rangle = \epsilon_n |\phi_n(t)\rangle, \quad (5.36)$$

de l'opérateur non Hermitique de Floquet

$$K(t) = H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} I, \quad (5.37)$$

ce qui confère aux valeurs propres ϵ_n le nom de quasi-énergie et aux états $|\phi_n(t)\rangle$ le nom état de quasi-énergie [62]. Ainsi, l'analyse des systèmes des Hamiltoniens périodiques non-Hermitiques $H(t)$ peut être réduite à l'étude de l'opérateur de Floquet $K(t) = H(t) - i\hbar(\partial/(\partial t))I$ indépendant du temps.

5.3 Oscillateur harmonique dans un champ linéaire imaginaire périodique

Dans ce paragraphe nous appliquerons la théorie de Floquet décrite ci dessus à un problème simple de l'oscillateur harmonique interagissant avec un champ linéaire déjà étudié dans cette thèse, mais cette fois ci le champ linéaire périodique est imaginaire et dépend du temps, ainsi notre système est décrit par un Hamiltonien non-Hermitique [63]. Bien que les valeurs propres et les fonctions propres de Floquet pour un système Hermitique aient été précédemment données dans le chapitre 3, nous allons les redériver dans le cas non-Hermitique, et étudier la \mathcal{PT} -symétrie ou pseudo \mathcal{PT} -symétrie de l'opérateur de Floquet.

L'Hamiltonien considéré est donné par l'équation (3.47) du chapitre 3 où $f(t) = \lambda \cos(\omega t + \phi)$ est remplacé par $if(t) = i\lambda \cos(\omega t + \phi)$

$$H(t) = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega_0^2}{2}x^2 - if(t)x. \quad (5.38)$$

La méthode pour trouver la solution de l'équation de Schrödinger (5.25) associée à ce système là ne diffère pas de celle de la méthode suivi au chapitre 3, il suffit de changer l'opérateur de déplacement $D(t)$ défini dans (3.51) par :

$$D(t) = e^{i(x\mathcal{P}_c(t) - p\mathcal{X}_c(t))} = e^{-\frac{i\hbar}{2}\mathcal{X}_c(t)\mathcal{P}_c(t)} e^{ix\mathcal{P}_c(t)} e^{-ip\mathcal{X}_c(t)}, \quad (5.39)$$

et son inverse

$$D^{-1}(t) = e^{+\frac{i\hbar}{2}\mathcal{X}_c(t)\mathcal{P}_c(t)} e^{ip\mathcal{X}_c(t)} e^{-ix\mathcal{P}_c(t)}. \quad (5.40)$$

Par conséquent, les équations du mouvement classique (3.54) deviennent :

$$\begin{aligned}
\dot{x}_c &= \frac{1}{m}p_c \\
\dot{p}_c &= -m\omega_0^2x_c + if(t) \\
\ddot{x}_c + m\omega_0^2x_c &= if(t),
\end{aligned} \tag{5.41}$$

dont les solutions sont :

$$x_c(t) = i\frac{\lambda \cos(\omega t + \phi)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}, \quad \dot{x}_c = -i\frac{\lambda\omega \sin(\omega t + \phi)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \tag{5.42}$$

L'action de l'opérateur $D(t)$ ainsi défini sur les opérateurs x et p est :

$$\begin{aligned}
D^{-1}(t)x D(t) &= x + \mathcal{X}_c(t) \\
D^{-1}(t)p D(t) &= p + \mathcal{P}_c(t).
\end{aligned} \tag{5.43}$$

L'Hamiltonien transformé défini dans les équations (3.50) et (3.58) s'écrit dans ce cas là :

$$\begin{aligned}
h(t) &= h_d^{OQL} + h_f^{OC}(t) + x(m\omega_0^2x_c - if(t) + \dot{p}_c) - x_c(0)(m\omega_0^2x_c - if(t) + \dot{p}_c) \\
&\quad + \frac{1}{2}(\dot{p}_c x_c - p_c \dot{x}_c) + \frac{1}{2}(\dot{p}_c x_c(0) - p_c(0)\dot{x}_c),
\end{aligned} \tag{5.44}$$

ou sous une forme simple,

$$h(t) = h_d^{OQL} + L(t), \tag{5.45}$$

où

$$h_d^{OQL} = \frac{1}{2m}(p - p_c(0))^2 + \frac{m\omega_0^2}{2}(x - x_c(0))^2, \tag{5.46}$$

représente l'Hamiltonien de l'oscillateur harmonique déplacé indépendant du temps. L'Hamiltonien classique

$$h_f^{OC}(t) = \frac{1}{2m}(p_c)^2 + \frac{m\omega_0^2}{2}(x_c)^2 - if(t)x_c, \tag{5.47}$$

décrit l'oscillateur harmonique forcé dépendant du temps.

Remarquons que l'hamiltonien transformé $h(t)$ (5.44) s'écrit comme

$$h(t) = h_d^{OQL} + L(t), \tag{5.48}$$

où la fonction "lagrangien classique"

$$\begin{aligned} L(t) &= h_f^{OC}(t) + \frac{1}{2} (\dot{p}_c x_c - p_c \dot{x}_c) + \frac{1}{2} (\dot{p}_c x_c(0) - p_c(0) \dot{x}_c) \\ &= \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \cos 2(\omega t + \phi) + \frac{1}{2} \frac{\lambda^2 \omega^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \cos \omega t \end{aligned} \quad (5.49)$$

peut être éliminée de l'Hamiltonien (5.44) en effectuant la transformation

$$|\Phi(t)\rangle = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' L(t') \right] D(t) e^{-\frac{i}{\hbar} h_d^{OQL} t} |\Psi(0)\rangle, \quad (5.50)$$

sur l'état initial. En évaluant l'intégrale

$$\int_0^t dt' L(t') = \frac{1}{4} \frac{\lambda^2 t}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} + \frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t$$

on déduit l'opérateur d'évolution non-unitaire associé pour l'Hamiltonien non-Hermitique périodique

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t \right) \right] \\ &D(t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(h_d^{OQL} + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) t \right] \end{aligned} \quad (5.51)$$

L'évolution au cours du temps de l'état initial $|\Phi(0)\rangle = |\Psi(0)\rangle$ peut être obtenue par l'action de l'opérateur de l'évolution (5.51) sur cet état initial. Comme a été noté, l'opérateur d'évolution $U(t)$ (5.51) est le produit de deux opérateurs

$$U(t) = Z(t) e^{-\frac{i}{\hbar} M t} \quad (5.52)$$

où $Z(t)$ est périodique

$$Z(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t \right) \right] D(t) \quad (5.53)$$

et M est donné par

$$M = h_d^{OQL} + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (5.54)$$

dont les valeurs propres appelées quasi-énergies sont :

$$\mathcal{E}_n = \hbar \omega_0 (n + 1/2) + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (5.55)$$

et sont illustrées sur la fig.1

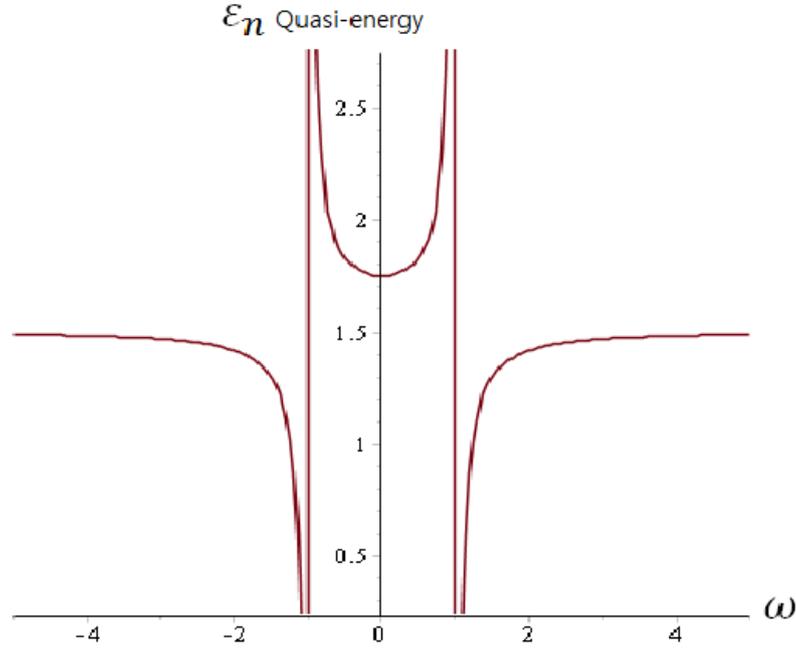


Fig.1. Quasi-énergies en fonction de ω .

où : $\omega_0 = n = m = \lambda = 1$. Au résonance $\omega = \omega_0$,

Nous constatons qu' au point de résonance $\omega = \omega_0$ le spectre de quasi-énergie devient infini par conséquent la formule (5.55) qui décrit les quasi-énergies n'est plus d'actualité.

Ainsi, la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger associé à l'Hamiltonien (5.38) est proportionnel aux fonctions Hermite \mathcal{H}_n

$$\begin{aligned} \Phi_n(x, t) = & \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-i \frac{\omega}{m} \left(\frac{\lambda \sin(\omega t + \phi)}{2(\omega_0^2 - \omega^2)} \right)^2 \right] \exp \left[i \left((n + 1/2)\omega_0 + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) t \right] \\ & \exp \left[-i \left(\frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t \right) \right] \\ & \exp[-ip_c(x - x_c)] \exp \left[-\frac{m\omega_0}{2} (x - x_c)^2 \right] \mathcal{H}_n(\sqrt{\omega_0 m}(x - x_c)) \end{aligned} \quad (5.56)$$

et correspond aux modes de Floquet périodiques..

Dans le cas particulier où $n = 0$, la quasi-énergie correspondante est celle du fondamental $\mathcal{E}_0 = \omega_0/2 + \lambda^2/4m(\omega_0^2 - \omega^2)$ d'où la solution s'écrit

$$\begin{aligned}
\Phi_0(x, t) = & \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega_0}{\pi} \right)^{1/4} \exp \left[-i \frac{\omega}{m} \left(\frac{\lambda \sin(\omega t + \phi)}{2(\omega_0^2 - \omega^2)} \right)^2 \right] \exp \left[i \left(\frac{1}{2} \omega_0 + \frac{1}{4} \frac{\lambda^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) t \right] \\
& \exp \left[-i \left(\frac{\lambda^2}{8m\omega(\omega_0^2 - \omega^2)} (\sin 2(\omega t + \phi) - \sin 2\phi) + \frac{\lambda^2 \omega}{2m(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \sin \omega t \right) \right] \\
& \exp[-ip_c(x - x_c)] \exp \left[-\frac{m\omega_0}{2} (x - x_c)^2 \right] \tag{5.57}
\end{aligned}$$

la probabilité d'occupation $P_t^{n=0}$ de l'état fondamental

$$P_t^{n=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Phi_0^*(x, t) \Phi_0(x, t) = \exp \left[\frac{\lambda^2 \omega^2}{m\omega_0(\omega_0^2 - \omega^2)^2} \right] \exp \left[\frac{\lambda^2 \cos^2(\omega t + \phi)}{m\omega_0(\omega_0^2 - \omega^2)} \right] \tag{5.58}$$

dépend du temps et elle est non-conservée, n (voir Fig.2a et Fig.2b et Fig.2c).

Nous avons tracé les courbes de $P_{n=0}^t$ en fonction de t , de ϕ et puis en fonction de ϕ et t .

On prend : $\omega = 3$, $\omega_0 = m = \lambda = 1$.

La figure Fig.2a représente la probabilité d'occupation $P_t^{n=0}$ de l'état fondamental en fonction de t :

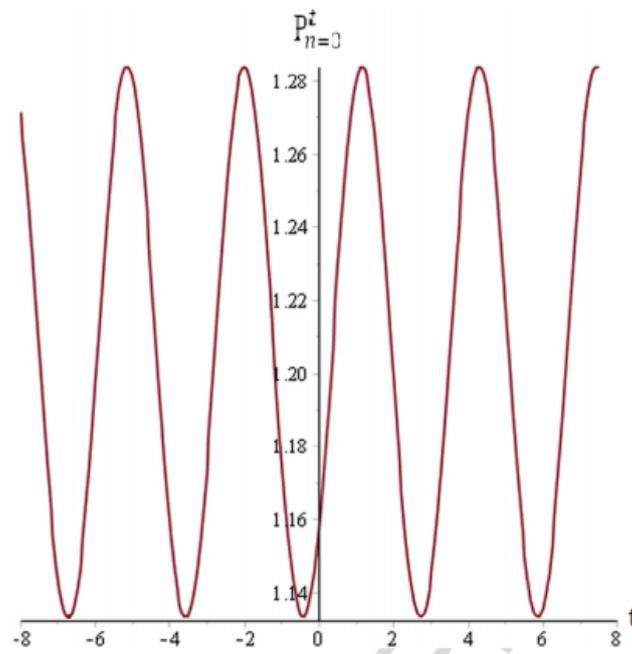


Fig.2a. Probabilité d'Occupation P_t en fonction du t . ($\phi = \pi$)

La figure Fig.2b représente la probabilité d'occupation $P_t^{n=0}$ de l'état fondamental en fonction de ϕ

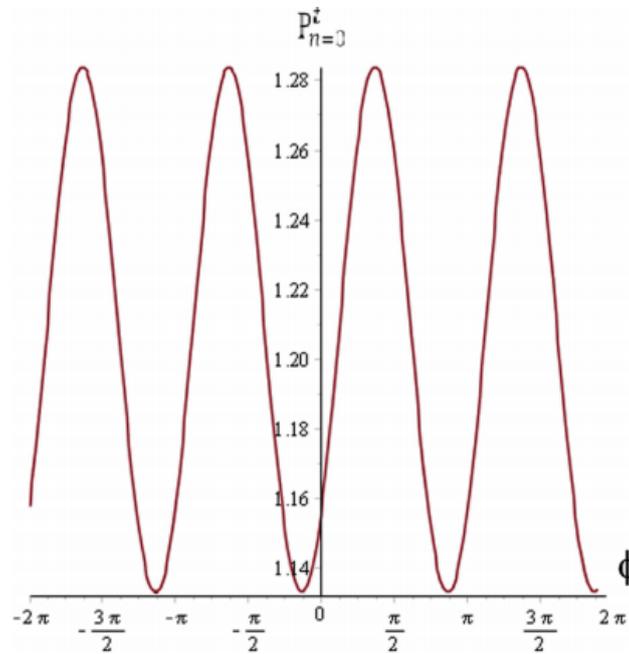


Fig.2b. Probabilité d'Occupation P_t en fonction de ϕ . ($t = 2$)

La figure Fig.2c représente la probabilité d'occupation $P_t^{n=0}$ de l'état fondamental en fonction de ϕ et t

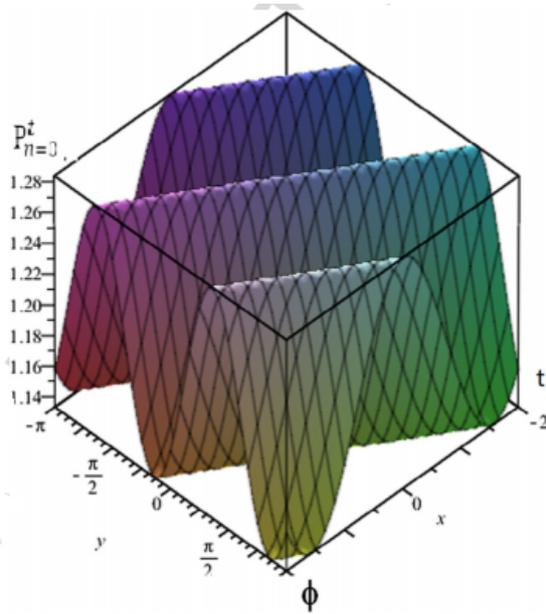


Fig.2c. Probabilité d'Occupation P_t en fonction du temps t et de ϕ .

Conclusion

En résumé, l'étude de la dynamique des Hamiltoniens non-Hermitiques dépendants du temps est très difficile en raison de la non-unitarité de l'opérateur d'évolution et par conséquent la dynamique de ces systèmes n'est pas en général stable. Dans cette thèse, en utilisant la décomposition de Floquet de l'opérateur d'évolution non-unitaire associé aux systèmes périodiques non-Hermitiques, nous avons présenté une analyse rigoureuse de la dynamique régit par des Hamiltoniens périodiques non-Hermitiques et introduit le concept de la pseudo- \mathcal{PT} -symétrie. Nous avons montré que la stabilité de la dynamique se produit lorsque la \mathcal{PT} symétrie de l'opérateur de Floquet $U(T) = e^{iMT}$ ou plus précisément de l'opérateur M est non-brisée ce qui correspond aux quasi-énergies réelles ϵ_n . Lorsque la \mathcal{PT} -symétrie de M est brisée, c'est à dire les quasi-énergies sont complexe conjuguées par pair, la dynamique est instable. Nous insistons sur le fait que la stabilité de la dynamique dépend de la brisure de la \mathcal{PT} -symétrie de l'opérateur M , et non pas de celle de l'Hamiltonien $H(t)$. Enfin pour illustrer cette théorie nous avons traité le cas de l'oscillateur harmonique interagissant avec un champ linéaire imaginaire.

Bibliographie

- [1] M. Le Bellac, Physique quantique : Fondements, Tome 1 (Savoirs actuels, EDP Sciences, 2013) 3e édition.
- [2] C. C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977) nouvelle édition revue, corrigée et augmentée.
- [3] A. Messiah, Mécanique quantique Tome1, Tome2, (Dunod, Paris,1995).
- [4] J. Hladik, M. Chrysos, Introduction à la mécanique quantique, (Dunod, Paris 2000).
- [5] N. Zettili, Quantum Mechanics : Concepts and Applications, (Wiley, 2009) Second Edition.
- [6] F.Schwabl, Quantum Mechanics, (Springer, Berlin Heidelberg New York 2007) Fourth Edition.
- [7] H. Bouchriha, Introduction à la physique quantique cours et applications, (centre de publication universitaire Tunis 2002).
- [8] Y. Kosmann-Schwarzbach, L.Meersseman, Les théorèmes de Nother, Invariance et lois de conservation au XXe siècle, (Palaiseau, 2006) 2ème édition.
- [9] C.S.Wu et al, experimental test of parity conservation in beta decay, phys.rev, 105, 1413-1415 (1957).
- [10] L. D. Landau et E. Lifchitz, Mécanique quantique (Mir, Moscou, 1967) traduit du russe par Edouard Gloukhian, 2ème éditionX.
- [11] G. G. de Polavieja and E. Sjöqvist, Extending the quantal adiabatic theorem : Geometry of noncyclic motion, Am. J. Phys. **66** (5), 431-438 (1998).
- [12] S. Teufel, Adiabatic Perturbation Theory in Quantum Dynamics, Lecture Notes in Mathematics 1821 (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2003).

-
- [13] H. R. Lewis, JR, Class of Exact Invariants for Classical and Quantum Time-Dependent Harmonic Oscillators, *J. Math. Phys.* **9**, 1976-1986 (1968).
- [14] H. R. Lewis, JR. and W. B. Riesenfeld, An Exact Quantum Theory of the Time-Dependent Harmonic Oscillator and of a Charged Particle in a Time-Dependent Electromagnetic Field, *J. Math. Phys.* **10**, 1458-1473 (1969).
- [15] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics* Prentice (Hall, Inc. Toronto 1995).
- [16] A. Galindo AD P. Pascual, *Quantum Mechanics* (Springer, Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1991).
- [17] J. E. Avron, *Adiabatic Quantum Transport* (Les Houches, E. Akkermans, et. al. eds. Elsevier Science, 1995).
- [18] M.V. Berry, Quantal phase factors accompanying adiabatic changes, *Proc. soc. A.* **392** 45 (1984).
- [19] G. Floquet, Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques, *Ann. Sci. Éc. Norm. Supér.* **12**, 47 (1883).
- [20] J.H. Shirley, Solution of the Schrödinger equation with a Hamiltonian periodic in time, *Phys. Rev.* **138**, B979 (1965).
- [21] P.K. Aravind, J.O. Hirschfelder, Two-state systems in semiclassical and quantized fields, *J. Phys. Chem.* **88**, 4788 (1984).
- [22] M. Grifoni, P. Hanggi, Driven quantum tunneling, *Phys. Rep.* **304**, 229(1998).
- [23] M. Holthaus, Floquet engineering with quasienergy bands of periodically driven optical lattices, *J. Phys. B.* **49**, 013001 (2016).
- [24] K. Husimi, *Miscellanea in Elementary Quantum Mechanics II*, *Progr. Theor. Phys.* **9**, 381 (1953); voir aussi F. H. Kerner, Note on the forced and damped oscillator in quantum mechanics, *Can. J. Phys.* **36**, 371 (1958).
- [25] C. M. Bender, S. Boettcher, Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5243-5246 (1998).
- [26] C. M. Bender, D. C. Brody, H. F. Jones, Complex Extension of Quantum Mechanics, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 270401-270404 (2002).

- [27] C. M. Bender, D. C. Brody, H. F. Jones, Erratum : Complex Extension of Quantum Mechanics, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 119902 (2002).
- [28] W. Pauli, On Dirac's New Method of Field Quantization, *Rev. Mod. Phys.* **15**, 175-207(1943).
- [29] S. N. Gupta, On the Calculation of Self-Energy of Particles *Phys. Rev.* **77**, 294-295(1950).
- [30] S. N. Gupta, Theory of Longitudinal Photons in Quantum Electrodynamics, *Proc.Phys. Soc. Lond.* **63**, 681-691 (1950).
- [31] E. C. G. Sudarshan, Quantum Mechanical Systems with Indefinite Metric. I, *Phys.Rev.* **123**, 2183-2193 (1961).
- [32] T. D. Lee, G. C. Wick, Negative metric and the unitarity of the S-matrix, *Nucl. Phys.B.* **9**, 209-243 (1969).
- [33] F. G. Scholtz, H. B. Geyer, . F. J. W. Hahne, Quasi-Hermitian operators in quantum mechanics and the variational principle, *Ann. Phys.* **213**, 74-101 (1992).
- [34] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry : The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian, *J. Math. Phys.* **43**, 205-214 (2002).
- [35] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry.II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with real spectrum, *J. Math. Phys.* **43**, 2814-2816 (2002).
- [36] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry.III. Equivalence of Pseudo Hermiticity and the presence of antilinear symmetries, *J. Math. Phys.* **43**, 3944-3951 (2002).
- [37] A. Mostafazadeh, Time-Dependent Pseudo-Hermitian Hamiltonians Defining a Unitary Quantum System and Uniqueness of the Metric Operator, *Phys Lett B.* **650**, 208 (2007).
- [38] A. Mostafazadeh, Comment on "Time-dependent quasi-Hermitian Hamiltonians and the unitary quantum evolution"0711.0137v1 [quant-ph] (2007)A.
- [39] Mostafazadeh, Comment on "Reply to Comment on Time-dependent Quasi-Hermitian Hamiltonians and the Unitary Quantum Evolution"0711.1078v2 [quant-ph] (2007).
- [40] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermitian representation of quantum mechanics, *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* **07**, 1191 (2010).

- [41] Jones H. F, On pseudo-Hermitian Hamiltonians and their Hermitian counterparts J. Phys.A : Math. Gen. **38**, 1741 (2005).
- [42] Z. H. Musslimani, K. G. Makris, R. El-Ganainy, and D. N. Christodoulides, Optical Solitons in PT Periodic Potentials, Phys. Rev. Lett. **100**, 030402 (2008).
- [43] K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, and Z. H. Musslimani, PT-symmetric optical lattices, Phys. Rev. A. **81**, 063807 (2010).
- [44] A. Guo, G. J. Salamo, D. Duchesne, R. Morandotti, M. Volatier- Ravat, V. Aimez, G. A. Siviloglou, and D. N. Christodoulides, Observation of PT-Symmetry Breaking in Complex Optical Potentials, Phys. Rev. Lett. **103**, 093902 (2009).
- [45] C. M. Bender, Making sense of non-Hermitian Hamiltonians, Rep. Prog. Phys. **70**, 947-1018 (2007).
- [46] M. Znojil, Special issue “Pseudo-Hermitian Hamiltonians in quantum physics in 2014”, Int. J. Theor. Phys. **54**, 3867 (2015).
- [47] C. Figueira de Morisson Faria and A. Fring, Time evolution of nonHermitian Hamiltonian systems, J. Phys. A. **39**, 9269 (2006).
- [48] C. Figueira de Morisson Faria and A. Fring, Non-Hermitian Hamiltonians with real eigenvalues coupled to electric ... elds : From the time-independent to the time dependent quantum mechanical formulation, Laser Phys. **17**, 424 (2007).
- [49] M. Znojil, Time-dependent quasi-Hermitian Hamiltonians and the unitary quantum evolution, 0710.5653v1 [quant-ph] (2007).
- [50] M. Znojil, Reply to Comment on “Time-dependent quasi-Hermitian Hamiltonians and the unitary quantum evolution, 0711.0514v1 [quant-ph] (2007).
- [51] M. Znojil, Time-dependent version of crypto-Hermitian quantum theory, Phys. Rev. D. **78**, 085003 (2008).
- [52] J. Gong and Q.-H. Wang, Geometric phase in \mathcal{PT} -symmetric quantum mechanics, Phys. Rev. A. **82**, 012103 (2010) ; Time-dependent \mathcal{PT} -symmetric quantum mechanics, J. Phys. A. **46**, 485302 (2013).
- [53] M. Maamache, Periodic pseudo-Hermitian Hamiltonian : Nonadiabatic geometric phase, Phys. Rev. A. **92**, 032106 (2015).

-
- [54] A.Fring and M.H.Y.Moussa, Unitary quantum evolution for time-dependent quasi-Hermitian systems with non observable Hamiltonians, *Phy.Rev. A.* **93**, 042114 (2016).
- [55] A.Fring and M.H.Y.Moussa, Non-Hermitian Swanson model with a time-dependent metric, *Phy. Rev. A.* **94**, 042128 (2016).
- [56] M. Znojil, Which operator generates time evolution in Quantum Mechanics?, 0711.0535v1[quant-ph] (2007).
- [57] B. Khantoul, A. Bounames and M. Maamache, On the invariant method for the time-dependent Non-Hermitian Hamiltonians, *Eur. Phys. J. Plus.*
- [58] M. Maamache, O. K. Djeghiour, N. Mana, W. Koussa, Pseudo-invariants theory and real phases for systems with non-Hermitian time-dependent Hamiltonians, *Eur. Phys. J. Plus* 132-383 (2017).
- [59] X. Luo, J. Huang, H. Zhong, X. Qin, Q. Xie, Y.S. Kivshar, C. Lee, Pseudo-Parity-Time Symmetry in Optical Systems, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 243902 (2013) .
- [60] H. Choutri, M. Maamache, S. Menouar, Geometric Phase for a Periodic Non-Hermitian Hamiltonian, *J. Korean Phys. Soc.* **40**, 358 (2002).
- [61] D.J. Moore, G.E. Stedman, Non-adiabatic Berry phase for periodic Hamiltonians, *J. Phys. A : Math. Gen.* **23**, 2049 (1990).
- [62] Y.B. Zel'dovich, The Quasienergy of a Quantum-mechanical System Subjected to a Periodic Action, *Sov. Phys. JETP.* **24**, 1006 (1967).
- [63] M. Maamache , S. Lamri, O. Cherbal, Pseudo PT-symmetry in time periodic non-Hermitian Hamiltonians systems, *Annals of Physics.* **378**, 150–161 (2017).