

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



UNIVERSITÉ FERHAT ABBAS - SETIF 1

FACULTÉ DES SCIENCES

THESE

Présentée au Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Option: Physique Théorique

Par

HASSOUL Sara

THÈME

**Théorie des invariants et les systèmes hamiltoniens
dépendants du temps**

Soutenue le 19 / 03 / 2022 devant le Jury:

BEKKAR Hacene

Prof Univ. Ferhat Abbas Sétif 1

Président

MENOUAR Salah

Prof Univ. Ferhat Abbas Sétif 1

Directeur de thèse

MAIRECHE Abdelmadjid

Prof Univ. de M'sila

Examineur

MEDJEDEL Soheyb

M.C.A Univ. de M'sila

Examineur

Remerciements

*Cette thèse a été pour moi une épreuve personnelle et professionnelle mais avant tout une riche expérience humaine. Elle m'a appris beaucoup sur-moi-même et sur les autres. J'en garderai, malgré les difficultés, d'agréables souvenirs avec véritable professeur. Elle représente également l'opportunité de dire merci à mon directeur de thèse le professeur **Salah MENOUAR** pour le support et l'assistance continus à la préparation de mon doctorat et pour sa patience, sa motivation et ses connaissances immenses dans la mécanique quantique et la théorie des invariants. Ses conseils m'ont aidé dans tout le temps de recherche et l'écriture de cette thèse.*

*Je tiens à remercier chaleureusement les membres du jury qui ont accepté de juger ce travail et d'y apporter leur caution : Monsieur **Hacene BEKKAR**, professeur à l'université de Sétif¹, qui me fait le grand honneur d'accepter la présidence du jury. Messieurs **Abdelmadjid MAIRECHE**, professeur à l'université de M'sila et **Soheyb MEDJEDEL**, maitre de conférences (A) à l'université de M'sila, pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de participer à ce jury.*

J'adresse aussi un remerciement spécial à mon enseignante le professeur Aziz Ghania de l'université Mohamed lamine Debaghine Sétif 2 pour leur soutien moral.

Je tiens à remercier Benchaalal Karima mon enseignante au l'école normal supérieure Kouba pour leur encouragement et leur aide.

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

- *Mes parents, pour son soutien de tous les instants, qui m'ont encouragé à poursuivre mon chemin.*
- *Mes sœurs Noura, Farida, Briza, Saliha et ses enfants, Siham et ses enfants, Nabila et ses enfants, pour leurs encouragements et leur aide.*
- *Mes frères Azzedine et Djamel et leurs enfants pour leurs soutiens moraux.*
- *Mes amis Nadia, Amel, Hanane, Sara et Amina.-Hanin et Asia (mes enseignantes dans la mémorisation du Coran).*
- *Boushaba Fayçal et sa femme Hafaf Hellou qui m'ont accueilli chez eux le jour où je n'avais nulle part où dormir.*
- *À tous ceux qui ont essayé de me faire sourire quand je me sentais déprimé.*
- *A tous ceux qui aiment Sara et ceux que Sara aime.*

Sara

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 0 | Introduction | 4 |
| 1 | Equation de Schrödinger dépendante du temps : | 9 |
| 1.1 | La base quantique pour la description d'un système physique | 9 |
| 1.1.1 | Equation de Schrödinger dépendante du temps | 10 |
| 1.1.2 | Principe de superposition | 10 |
| 1.1.3 | Incertitude de Heisenberg | 11 |
| 1.2 | Méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps | 13 |
| 1.2.1 | Transformation unitaire | 13 |
| 1.2.2 | Opérateur d'évolution | 14 |
| 1.2.3 | Changement de représentation de Heisenberg et théorème d'Ehrenfest | 15 |
| 1.2.4 | Théorie de perturbation dépendante du temps | 17 |
| 1.2.5 | Théorème adiabatique | 19 |
| 1.2.6 | Phase de Berry | 20 |
| 1.2.7 | Généralisation non adiabatique | 23 |
| 2 | Théorie des invariants | 26 |
| 2.1 | Introduction | 26 |
| 2.2 | Théorème de Liouville et l'invariant mécanique | 27 |
| 2.3 | Equation de Liouville en mécanique quantique | 30 |
| 2.4 | Construction d'opérateur invariant | 31 |
| 2.5 | Relation équation de Schrödinger et théorie des invariants | 33 |

| | | |
|----------|--|-----------|
| 2.6 | Application : Oscillateur harmonique avec masse et fréquence variables | 37 |
| 3 | Dynamique quantique d'un oscillateur couplé dépendant du temps | 42 |
| 3.1 | Introduction | 42 |
| 3.2 | Invariant classique du système | 43 |
| 3.3 | Invariant quantique et opérateurs d'échelle | 47 |
| 3.4 | Valeurs propres et fonctions d'onde | 49 |
| 3.5 | Application et discussion | 52 |
| 4 | Etude quantique de trois oscillateurs couplés dépendants du temps | 55 |
| 4.1 | Introduction | 55 |
| 4.2 | Le modèle hamiltonien | 56 |
| 4.3 | Transformations unitaires | 58 |
| 4.4 | Matrice de rotation et diagonalisation de l'hamiltonien | 60 |
| 4.5 | Solutions quantiques | 67 |
| 5 | Invariant dynamique de trois oscillateurs couplés dépendant du temps | 74 |
| 5.1 | Introduction | 74 |
| 5.2 | Construction de l'invariant classique | 75 |
| 5.3 | Invariant quantique | 77 |
| 5.4 | Diagonalisation de l'opérateur invariant | 79 |
| 5.5 | Application en mécanique quantique | 82 |
| 5.5.1 | Etats propres de l'invariant | 83 |
| 5.5.2 | Fonctions d'ondes de l'hamiltonien original | 86 |
| 6 | Conclusion | 88 |
| 7 | Bibliographie | 91 |

Introduction

0. Introduction

Les problèmes dynamiques en mécanique quantique et classique sont d'un intérêt majeur dans différents domaines de la physique, les mathématiques et la chimie. En mécanique classique, il faut résoudre les équations de Newton¹ ou celles de Hamilton et Lagrange pour comprendre le comportement du système étudié. Par contre, en mécanique quantique, le point de départ, dans toute description quantique d'un système est bien sûr la formulation de son opérateur hamiltonien H . Vient par la suite la connaissance de l'état du système, i.e. sa fonction d'onde, et éventuellement le spectre énergétique de l'hamiltonien qui lui est associé. Pour les phénomènes non relativistes², ceci nous amène à résoudre la fameuse équation de Schrödinger associée à l'opérateur hamiltonien H . Pour les systèmes stationnaires, c'est-à-dire dont l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, l'équation de Schrödinger se réduit à une équation aux valeurs propres après séparation des variables d'espace et du temps.

Pour les systèmes régis par des hamiltoniens dépendant explicitement du temps, la technique de séparation des variables spatiales et du temps dans l'équation de Schrödinger associée n'est pas toujours adaptée et pour cette raison la résolution du problème est souvent plus compliquée. En fait, hormis quelques cas extrêmement rares, il n'est en général pas possible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Pour cette raison, on est dans l'obligation de faire appel à des méthodes approximatives dont chacune peut être mieux adaptée pour certains types de potentiels. Parmi ces méthodes approchées, la méthode des perturbations dépendants du temps [1, 2], cette dernière est appliquée notamment lorsque le terme dépendant du temps est petit devant les écarts entre les niveaux énergétiques. Néanmoins, elle demeure restrictive puisqu'elle s'applique uniquement dans des cas particuliers. L'approximation adiabatique[3] représente aussi une technique très puissante dans la solution de l'équation de Schrödinger et

¹Depuis les travaux de Newton (1687), l'idée que l'évolution temporelle d'un système physique quelconque est bien modélisée par une équation différentielle (ou ses généralisations à la théorie des champs, les équations aux dérivées partielles) est admise.

²L'équation relativiste correcte pour le mouvement d'un électron a été découverte par Dirac une année après que Schrödinger ait proposé son équation.

la phase de Berry³, et elle est relativement valable lorsque les paramètres dépendants du temps dans l'hamiltonien varient très lentement par rapport à tous les termes caractéristiques du système. Dans le cas extrême où l'hamiltonien du système varie subitement avec le temps on parle d'approximation soudaine [3]. Cette approximation s'applique notamment pour une certaine catégorie de potentiels où le changement dans l'hamiltonien occupe un intervalle de temps très court mais fini.

En général, quand on utilise les méthodes d'approximations, il est supposé qu'on sait résoudre avec exactitude l'équation relative à la partie prépondérante de l'opérateur hamiltonien original du système. Par conséquent, la recherche de nouveaux problèmes dépendants du temps qui se prêtent à des résolutions exactes demeure toujours un axe de recherche d'actualité et d'intérêt particulier en physique.

Ainsi, la recherche de méthodes ou approches générales de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire ou dépendante du temps a toujours intéressé aussi bien les physiciens que les mathématiciens. Il existe maintenant plusieurs techniques de résolution "exacte" de l'équation de Schrödinger pour des potentiels dits "exactement solubles", qui sont en fait équivalentes dans le fond mais dont chacune peut être plus ou moins mieux adaptée à certains types de potentiels. La méthode standard pour résoudre exactement l'équation de Schrödinger, consiste à construire l'opérateur d'évolution⁴ associé [1, 2, 3, 4]. Cette méthode a été utilisée avec succès pour résoudre pratiquement tous les potentiels exactement solubles connus en physique et a montré son efficacité même pour certains potentiels dépendants du temps.

En général, quand les paramètres d'un hamiltonien dépend explicitement du temps, on ne peut pas parler ni d'un système conservatif ni de constante du mouvement. Néanmoins, l'existence d'observables dites constantes du mouvement ou les intégrales premières du mouvement, autrement dit dont les opérateurs associés sont invariants dans le temps,

³Berry a découvert cette phase en 1984

⁴C'est l'opérateur qui transforme l'état quantique au temps t_0 en l'état quantique au temps t résultant de l'évolution du système sous l'effet de l'opérateur hamiltonien.

nous peut aider à comprendre mieux l'évolution du système étudié. Parmi les méthodes alternatives, aboutissant sur des solutions exactes pour les équations de type de Schrödinger et autres, il y a la méthode des invariants qui a été initiée par Lewis et Riesenfeld [5, 6, 7]. Elle repose sur la résolution d'une équation aux valeurs propres relative à un opérateur dit invariant et satisfaisant certaines conditions requises. En plus de sa simplicité pour obtenir la phase totale et les fonctions d'ondes des hamiltoniens hermitiens dépendants du temps, comparativement avec les autres approches, elle a aussi l'avantage de pouvoir traiter de nouveaux hamiltoniens tels que les hamiltoniens non hermitiens [8, 9, 10, 11] et les hamiltoniens pseudo-hermitiens [12, 13, 14, 15].

L'objectif principal de cette thèse est basé sur la méthode des invariants en la décrivant d'une façon détaillée et en l'utilisant pour traiter exactement certains hamiltoniens dépendant du temps, associés à des problèmes concrets de physique.

Nous avons préféré présenter un rappel succinct des éléments fondamentaux sur l'équation de Schrödinger et la théorie des invariants dans la mécanique quantique tout en décrivant brièvement les différentes méthodes approximatives et exactes citées plus haut. Cela a été fait par un souci de clarté du manuscrit car les deux facteurs (équation de Schrödinger et théorie des invariants), s'appliquent manifestement dans notre travail.

Le manuscrit est organisé en cinq chapitres en plus d'une conclusion.

Le premier chapitre représente un rappel introductif sur les différentes méthodes approximatives et exactes utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger dans le cas stationnaire et le cas dépendant du temps.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons et décrivons brièvement la méthode des invariants de Lewis-Riesenfeld qui nous servira dans le reste du notre travail. Notre façon de présenter cette méthode est originale selon l'approche initiée par Lewis et Riesenfeld.

Le travail original réalisé dans cette thèse est divisé en trois chapitres (3,4,5). Le troisième chapitre concerne le traitement exact du modèle de l'oscillateur couplé dépendant du temps à (2D) [16]. Sur la base de la théorie des invariants classiques, nous construisons l'invariant dynamique quantique du système qui satisfait l'équation de Liouville-von Neu-

mann. L'expression mathématique de cet invariant implique un terme croisé qui couple les deux oscillateurs mutuellement. Cependant, nous montrons qu'en introduisant deux paires d'opérateurs d'annihilation et de création, nous pouvons découpler l'opérateur invariant original à un autre qui décrit deux oscillateurs indépendants. En utilisant une approche de la transformation unitaire, nous obtenons les valeurs et vecteurs propres de l'invariant transformé. Et par conséquent nous obtenons finalement les fonctions d'onde du système dans les états de Fock. Pour illustrer la validité de notre théorie, nous appliquons nos résultats dans le calcul des fluctuations de variables canoniques et des produits d'incertitude dans le cas où les fréquences et les masses sont exponentiellement croissantes.

Dans les deux derniers chapitres 4 et 5, nous traitons un problème à trois dimensions (3D) concernant le modèle de l'oscillateur harmonique couplé dépendant du temps [17, 90].

Le chapitre 4 est consacré à la résolution exacte de l'équation de de Schrödinger pour un système physique décrit par trois oscillateurs couplés dépendants du temps basée sur un découplage exacte concernant l'hamiltonien original du système. En utilisant une approche alternative de la transformation unitaire, cet hamiltonien est transformé en un autre simple associé aux trois oscillateurs couplés dont les masses sont égales à l'unité. Pour diagonaliser l'hamiltonien transformé, nous introduisons un nouvel opérateur unitaire. Cette transformation correspond à une rotation tridimensionnelle paramétrée par des angles d'Euler. L'importance de ce découplage est qu'il nous permet de développer une théorie exacte pour le traitement mécanique du système couplé à l'origine sans aucune restriction sur la forme de paramètres dépendant du temps. Finalement, nous développons les solutions quantiques du système avec la dérivation des fonctions d'onde à l'aide d'un opérateur invariant dynamique.

Dans le chapitre 5, sur la base du système étudié dans le chapitre précédent, nous construisons un opérateur invariant pour un oscillateur couplé dépendant du temps à trois dimensions. Nous montrons que l'opérateur invariant que nous avons établi, coïn-

cide avec son homologue classique. Pour diagonaliser l'invariant, nous effectuons d'abord une transformation unitaire. A partir d'une telle transformation, l'opérateur invariant quantique se réduit à un autre simple, qui correspond à trois oscillateurs couplés avec des masses égales à l'unité. Par la suite, nous diagonalisons la matrice qui représente l'invariant transformé en utilisant une matrice unitaire. L'invariant diagonalisé est exactement le même que l'hamiltonien de trois oscillateurs simples. Enfin nous déduisons les fonctions propres de l'opérateur invariant, mais également les fonctions d'onde du système dans les états de Fock.

Nous terminons ce travail par une conclusion générale résumant l'ensemble des résultats obtenus.

Chapitre 1

Equation de Schrödinger dépendante du temps :

1.1 La base quantique pour la description d'un système physique

La théorie de la mécanique quantique décrit la matière par des "ondes de matière" qui évoluent selon l'équation de Schrödinger¹. Ces ondes ont une signification probabiliste en physique. En mécanique quantique l'état d'une particule est décrit par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$. De manière plus abstraite, l'état est spécifié par la donnée d'un vecteur d'état, noté $|\Psi\rangle$, élément d'un espace de *Hilbert*² \mathcal{H} . L'espace des états \mathcal{H} est un espace vectoriel, en général de dimension infini, et muni du produit hermitien (produit scalaire), noté $\langle\varphi | \Psi\rangle$, satisfaisant la propriété $\langle\varphi | \psi\rangle = \langle\psi | \varphi\rangle^*$. Il s'exprime en terme des fonctions d'onde correspondantes comme [19]

¹E. Schrödinger, Annalen der Physik ,Vierte Folge ,Band 80,p.437(1926).

²Le concept d'espace de Hilbert étend les méthodes de l'algèbre linéaire en généralisant les notions d'espace euclidien (comme le plan euclidien ou l'espace usuel de dimension 3) et d'espace hermitien à des espaces de dimension quelconque (finie ou infinie).

$$\langle \varphi | \Psi \rangle \stackrel{def}{=} \int d^3r \varphi^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}). \quad (1.1)$$

La fonction d'onde représente une amplitude de densité de probabilité. La quantité $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ mesure la probabilité de trouver la particule à l'instant t dans le volume d^3r . Une conséquence immédiate aussi, est la condition de normalisation

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1, \quad (1.2)$$

qui exprime que la probabilité d'être quelque part vaut 1. Les quantités physiques sont représentées par des opérateurs linéaires agissant dans l'espace des états de *Hilbert*.

1.1.1 Equation de Schrödinger dépendante du temps

L'équation de Schrödinger est décrit l'évolution dans le temps d'une particule massive non-relativiste, et elle est rempli ainsi le même rôle que le principe fondamental de la dynamique de Newton en mécanique classique. On appelle un système quantique dépendant du temps tout système quantique régi par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (1.3)$$

où l'hamiltonien $H(t)$ dépend explicitement du temps à travers un ensemble de paramètres dépendant du temps $\{\chi_i(t), i = 1, 2, \dots\}$, ces derniers peuvent représenter l'interaction du système considéré avec des champs externes dépendant du temps (champ électrique, champ magnétique, ...) ou, tout simplement, des paramètres internes dépendant du temps (la masse, la charge, la profondeur d'un puits de potentiel, ...).

1.1.2 Principe de superposition

L'équation de Schrödinger est une équation différentielle du premier ordre par rapport au temps et du second ordre par rapport aux coordonnées de l'espace ordinaire. Ce qui

signifie que la donnée d'un état initial $|\psi(t_0)\rangle$ suffit à déterminer $|\psi(t)\rangle$ à tout instant ultérieur t . Ceci n'est valable que si l'évolution n'est pas interrompue par une mesure d'une grandeur physique du système. Cette équation est également linéaire et homogène. Ses solutions sont donc linéairement superposables [18, 19]. Si $|\psi_1(t)\rangle$ et $|\psi_2(t)\rangle$ sont deux solutions de l'équation (1.1) et si l'état initial du système est défini par $c_1 |\psi_1(t_0)\rangle + c_2 |\psi_2(t_0)\rangle$, alors l'état du système au temps t est donné par $c_1 |\psi_1(t)\rangle + c_2 |\psi_2(t)\rangle$. Il existe donc une correspondance linéaire entre $|\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle$.

1.1.3 Incertitude de Heisenberg

Si nous prenons des observables A et B qui commutent, il existe des états propre communs à ces observables. Il en résulte qu'une mesure "précise" de A et de B est en principe possible. Plus précisément si $\Psi_{a,b}(x)$ est un état propre de \hat{A} et de \hat{B} de valeurs propres a, b respectivement (que nous supposons non dégénérées) [19], alors

$$\hat{A}\Psi_{a,b} = a\Psi_{a,b} \quad , \quad \hat{B}\Psi_{a,b} = b\Psi_{a,b}. \quad (1.4)$$

Un état physique dont l'amplitude de probabilité est donnée par $\Psi_{a,b}$ est un état pour lequel une mesure de \hat{A} et \hat{B} donnera toujours pour résultats a et b

$$\langle \hat{A} \rangle_{a,b} = \int \Psi_{a,b}^*(x) \hat{A}\Psi_{a,b}(x) dx = a, \quad (1.5)$$

$$\langle \hat{B} \rangle_{a,b} = \int \Psi_{a,b}^*(x) \hat{B}\Psi_{a,b}(x) dx = b, \quad (1.6)$$

$$\Delta \hat{A}_{a,b}^2 = \int \Psi_{a,b}^*(x) (\hat{A} - a)^2 \Psi_{a,b}(x) dx = 0, \quad (1.7)$$

$$\Delta \hat{B}_{a,b}^2 = \int \Psi_{a,b}^*(x) (\hat{B} - b)^2 \Psi_{a,b}(x) dx = 0. \quad (1.8)$$

Par contre si \hat{A} et \hat{B} ne commutent pas, il est impossible de trouver un état physique

pour lequel une mesure de \hat{A} et mesure de \hat{B} donneraient des valeurs précises. En effet, nous définissons l'opérateur hermitien \hat{C} par la relation

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \quad (1.9)$$

Le fait que, le produit des incertitudes dans la mesure des observables \hat{A} et \hat{B} soit toujours supérieur (ou égal) à la moitié de la valeur absolue de la valeur moyenne du commutateur de \hat{A} et \hat{B} , nous a permis d'écrire la relation suivante sous la forme

$$(\Delta\hat{A}) (\Delta\hat{B}) \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|. \quad (1.10)$$

Dans le cas particulier où $\hat{A} = \hat{x}$ et $\hat{B} = \hat{p}$, nous déduisons la relation de commutation

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar 1, \quad (1.11)$$

et par conséquent nous avons

$$(\Delta\hat{x}) (\Delta\hat{p}) \geq \frac{1}{2} \hbar, \quad (1.12)$$

où \hbar est la constante de Planck réduite. Cette relation représente le principe d'incertitude ou, plus correctement, principe d'indétermination, aussi connu sous le nom de principe d'incertitude de Heisenberg, désigne toute inégalité mathématique affirmant qu'il existe une limite fondamentale à la précision avec laquelle il est possible de connaître simultanément deux propriétés physiques d'une même particule³. Cette limite s'applique principalement aux objets microscopiques et devient négligeable pour les objets macroscopiques.

³Cette notion est fréquemment vulgarisée par des phrases du type : « Il est impossible de connaître à la fois la position et la quantité de mouvement d'un objet de manière précise ».

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

L'introduction d'une équation fondamentale de la mécanique quantique par Schrödinger, a donné un pas de motivation à la communauté scientifique de chercher des techniques de résolution adéquates pour cette équation. Jusqu'au présent, il existe une variété de techniques dont chacune peut être mieux adaptée à des cas bien spécifiés et particuliers. Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée. En pratique, il existe plusieurs techniques de résolutions. Le but est de trouver la solution $|\psi(t)\rangle$ correspondant à la condition initiale $|\psi(t_0)\rangle$, pour cela on peut citer quelques méthodes intéressantes qui ont une relation directe avec ce qui va suivre de notre travail.

1.2.1 Transformation unitaire

Soit U un opérateur linéaire qui peut être indépendant ou dépendant du temps et qui satisfait la condition

$$UU^+ = U^+U = 1, \quad (1.13)$$

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

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Phi(t)\rangle. \quad (1.14)$$

En dérivant Eq (1.14) partiellement par rapport à t et en utilisant les Eqs (1.3) et (1.13) nous obtenons l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = \left[U^{-1}(t) H(t) U(t) - i\hbar U^{-1}(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} \right] |\Phi(t)\rangle. \quad (1.15)$$

Le nouveau hamiltonien s'écrit

$$\hat{h}(t) = U^{-1}(t) H(t) U(t) - i\hbar U^{-1}(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t}. \quad (1.16)$$

Alors le but général de la transformation unitaire est de simplifier la résolution de l'équation de Schrödinger associée à un hamiltonien $H(t)$ donné.

1.2.2 Opérateur d'évolution

L'opérateur d'évolution est l'opérateur $U(t, t_0)$ qui transforme l'état quantique d'un système au temps t_0 en un état quantique au temps t résultant de l'évolution du système sous l'effet de l'opérateur hamiltonien. Cet opérateur est unitaire

$$U^+(t, t_0) U(t, t_0) = U(t, t_0) U^+(t, t_0) = I, \quad (1.17)$$

où I est l'opérateur identité. Comme le système est donné par l'équation de Schrödinger,

on a

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.18)$$

où $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$, par conséquent on peut écrire

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H(t) U(t, t_0). \quad (1.18)$$

Dans le cas particulièrement simple où l'opérateur hamiltonien H est indépendant du temps, l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ s'écrit alors :

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)}. \quad (1.19)$$

Pour un système dont l'hamiltonien est dépendant du temps, on peut résoudre par itération l'équation différentielle satisfaite par l'opérateur U . On obtient

$$\begin{aligned}
 U(t, t_0) = & 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) + \dots \quad (1.20) \\
 & - \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n) + \dots
 \end{aligned}$$

En introduisant l'opérateur de produit chronologique T tel que :

$$T [H(t_1) \dots H(t_n)] = H(t_{\sigma(1)}) \dots H(t_{\sigma(n)}), \quad (1.21)$$

$$t_{\sigma(1)} \rangle t_{\sigma(2)} \rangle \dots \rangle t_{\sigma(n)}, \quad (1.22)$$

où σ est une permutation de $1, \dots, n$, donc on écrit $U(t, t_0)$ sous la forme

$$U(t, t_0) = T \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right), \quad (1.23)$$

1.2.3 Changement de représentation de Heisenberg et théorème d'Ehrenfest

Cette représentation est plus utile pour les théories quantiques relativistes des champs, et est en fait la seule vraiment cohérente mathématiquement dans ce cas.

Soit un système d'espace des états de Hilbert \mathcal{H} et de hamiltonien H indépendant du temps. Soit A une grandeur physique et A_s l'observable qui lui associe (l'indice s est utilisé pour la représentation de Schrödinger). Si le système est dans l'état initial $|\Psi(0)\rangle$, alors on peut écrire l'évolution de cet état comme $|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle$,

La valeur moyenne (Espérance d'une mesure) de A sur ce système est

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi(t) | A_s | \Psi(t) \rangle. \quad (1.24)$$

Nous pouvons trouver les mêmes résultats en faisant agir un opérateur $A_H(t)$ (l'indice H est pour la représentation de Heisenberg) sur l'état fixe $|\Psi(0)\rangle$. Nous avons

$$\langle \Psi(0) | A_H | \Psi(0) \rangle = \langle A \rangle(t) = \langle \Psi(t) | A_s | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | U^{-1}(t) A_s U(t) | \Psi(0) \rangle. \quad (1.25)$$

Pour tout état $|\Psi(0)\rangle$, on peut écrire $A_H(t)$ comme suit

$$A_H(t) = U^{-1}(t) A_s U(t). \quad (1.26)$$

Puisque l'opérateur d'évolution vérifie l'équation (1.19), on déduit donc l'équation d'évolution pour A_H sous la forme

$$\frac{dA_H(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A_H(t)] + U^{-1}(t) \frac{\partial A_s}{\partial t} U(t). \quad (1.27)$$

En définissant $(\partial A / \partial t)$ comme étant le dernier terme de l'équation (1.27), nous avons

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A_H] + \frac{\partial A_H}{\partial t} \quad \rightarrow \quad (\text{Equation de Heisenberg}). \quad (1.28)$$

Le cas le plus important est celui où A_s ne dépend pas du temps, on a alors

$$\frac{dA_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, A_H]. \quad (1.29)$$

Cette formulation de la mécanique quantique, où les vecteurs d'état restent fixes alors que les observables varient, s'appelle la représentation de Heisenberg, par opposition à la représentation de Schrödinger, où les vecteurs d'état varient et les observables restent fixes. Nous traitons maintenant, comment évoluer la valeur moyenne de $\langle A \rangle$.

En multipliant l'équation de Heisenberg à gauche par $\langle \Psi(0) |$ et à droite par $|\Psi(0)\rangle$, nous obtenons la relation

$$\langle \Psi(0) | \frac{dA_H}{dt} | \Psi(0) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \Psi(0) | A_H | \Psi(0) \rangle = \frac{d\langle A \rangle}{dt}, \quad (1.30)$$

d'où, nous pouvons écrire cette dernière équation sous la forme suivante

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A_H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A_H}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.31)$$

Puisque A_H et A_s sont unitairement conjugué par les opérateurs qui commutent avec H , on a aussi

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A_s] \rangle + \left\langle \frac{\partial A_s}{\partial t} \right\rangle. \quad (1.32)$$

Nous remarquons que, les crochets des membres de droite représentent les valeurs moyennes de A sur l'état considéré. Cet état est $|\Psi(0)\rangle$ dans la représentation de Heisenberg et $|\Psi(t)\rangle$ dans la représentation de Schrödinger. En se souvenant de ce point, on écrit ces deux équations sous la forme

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \rightarrow \text{(Théorème d'Ehrenfest)}. \quad (1.33)$$

Cette relation est valable pour les deux représentations.

1.2.4 Théorie de perturbation dépendante du temps

La théorie de la perturbation est un outil important pour la description des systèmes quantiques réels, car l'obtention des solutions exactes de l'équation de Schrödinger pour des hamiltoniens de systèmes complexes c'est une tâche très difficile. L'idée générale de la méthode est de dégager les effets principaux qui rendent compte globalement du comportement du système, et ensuite de détailler certaines quantités qui découlent d'effets secondaires moins importants.

En effet, la solution de l'équation de Schrödinger pour l'opérateur d'évolution suivante :

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H(t) U(t, t_0), \quad (1.34)$$

peut s'écrire, sous la forme intégrale suivante :

$$U(t, t_0) = 1 - i\hbar^{-1} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'. \quad (1.35)$$

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

$$H(t) = H_0(t) + V(t), \quad (1.36)$$

où $H_0(t)$ est un hamiltonien d'une équation de Schrödinger que l'on sait intégrer exactement et $V(t)$ une fonction quelconque. On montre que la solution de l'équation (1.35) est donnée par la série

$$U(t, t_0) = U^{(0)}(t, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} U^{(n)}(t, t_0), \quad (1.37)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^{(0)}(t, t_0) = H_0(t) U^{(0)}(t, t_0), \quad (1.38)$$

avec la condition initiale

$$U^{(0)}(t, t_0) = 1, \quad (1.39)$$

et les $U^{(n)}(t, t_0)$, $\forall n \geq 1$ sont données par l'expression

$$U^{(n)}(t, t_0) = (i\hbar)^{-n} \int_{\langle t'_{n-1} \rangle_{t_0}}^{\langle t'_n \rangle} dt'_n dt'_{n-1} \dots dt'_1 U^{(0)}(t, t'_n) V(t'_n) U^{(0)}(t'_n, t'_{n-1}) V(t'_{n-1}) U^{(0)}(t'_n, t'_1) V(t'_1) U^{(0)}(t'_1, t_0), \quad (1.40)$$

La théorie des perturbations s'applique en générale aux cas où $H_0(t)$ est indépendant

du temps et là où la partie dépendant du temps $V(t)$ est petite par rapport à H_0 et peut être considérée comme une perturbation, c'est-à-dire on peut toujours l'écrire sous la forme

$$V(t) = \lambda W(t), \quad (1.41)$$

avec $\lambda \ll 1$ et $W(t)$ est de l'ordre de grandeur de H_0 .

Au contraire à la théorie des perturbations indépendantes du temps, on ne peut pas parler ici des corrections des valeurs propres, car les énergies dans ce cas ne sont pas conservées. Cependant cette méthode permet de trouver approximativement les fonctions d'onde à partir des états stationnaires du système non perturbé.

1.2.5 Théorème adiabatique

Avant d'aborder le facteur de phase géométrique, il est nécessaire d'expliquer ce que l'on entend par adiabatique dans le contexte de la mécanique quantique. Dans la thermodynamique classique, adiabatique signifie qu'aucune chaleur n'est échangée entre le système et son environnement, mais ici, aucun appel à la chaleur n'est fait. Pour une illustration intuitive d'un processus adiabatique en ce sens, nous imaginons un pendule parfait à l'intérieur d'une boîte. Si nous transportons la boîte d'une manière très douce et régulière, le pendule continuera à osciller dans le même plan (ou dans un plan parallèle) avec la même amplitude. Généralement, il est nécessaire pour un tel processus, que le temps externe caractéristique T_e dans notre cas le temps qu'il nous a fallu pour déplacer la boîte soit beaucoup plus grand que le temps interne caractéristique T_i de la période de notre pendule parfait : $T_e \gg T_i$. Le concept de mécanique quantique d'un processus adiabatique peut être énoncé sous la forme d'un théorème, publié pour la première fois par Max Born et Vladimir Fock en 1928 [20].

Pour un hamiltonien subissant un changement progressif d'un certain H_i initial à un certain H_f final, si le système est dans un état propre $|n\rangle$ correspondant à la n ème valeur propre (discrète, non dégénérée) de H_i , il sera porté dans l'état propre $|n\rangle$ de H_f

avec sa valeur propre correspondante.

Physiquement, l'hypothèse adiabatique signifie que le taux (la vitesse) de transition entre états propres est petit par rapport à la fréquence de Bohr $f_{mn} = (E_m - E_n)/2\pi\hbar$ pour la transition $n \rightarrow m$. Autrement dit, les transition entre états propres différents sont donc infiniment lentes et n'ont en fait pas lieu⁴. Si le système se trouve initialement dans le $n^{\text{ème}}$ état propre, il y restera toujours.

1.2.6 Phase de Berry

La phase de Berry, plus correctement (mais moins communément) appelée phase géométrique, est une phase mesurable acquise par un système quantique subissant un changement cyclique lent (c'est-à-dire adiabatique) de ses paramètres. C'est une phase non triviale et ne peut être supprimée, en fonction uniquement du chemin à travers l'espace de paramètres. Nommé d'après Sir Michael Berry, qui a publié un article [21] à ce sujet en 1984, il a en fait été découvert par S. Panchararnam en 1956 en étudiant la lumière polarisée passant à travers les cristaux. Un résultat similaire, d'une fonction d'onde acquérant un facteur de phase non trivial dans (ce qui peut être considéré comme) subissant un changement cyclique (mais pas nécessairement adiabatique), est connu sous le nom d'effet Aharonov-Bohm, et sera traité en cet article du point de vue de Berry. Tout bien considéré, la phase de Berry est un effet général et il est donc presque surprenant qu'il ait fallu attendre 1984 pour généraliser fermement ce phénomène.

Supposons que l'hamiltonien dépend du temps à travers des paramètres $R(t)$. L'équation de Schrödinger dépendante du qui régit l'évolution du système s'écrit sous la forme

$$H(R(t))|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle. \quad (1.42)$$

A tout instant t fixe, il existe une solution à l'équation des valeurs propres

⁴C'est-à-dire que l'évolution temporelle du système est diagonale dans la base qu'on a choisi. En d'autre terme on néglige des couplages non-adiabatiques entre les états propres de l'hamiltonien.

$$H(R) |n(R)\rangle = E_n(R) |n(R)\rangle. \quad (1.43)$$

Cependant, le théorème adiabatique nous dit que, pour un H changeant progressivement, l'état $|n(R(0))\rangle$ restera dans l'état $|n(R(t))\rangle$ quelle que soit la valeur de t , en prenant au plus un facteur de phase, qui n'affecte pas l'équation de la valeur propre, on peut donc exprimer l'état, qui était en $|n(R(0))\rangle$ à $t = 0$, à tout moment comme

$$|\Psi(t)\rangle = |n(R(t))\rangle \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t E'_n(R(t')) dt'\right) \exp(i\gamma_n(t)). \quad (1.44)$$

Le deuxième terme est appelé le facteur de phase dynamique, et peut être considéré $-iE_n t/\hbar$ comme un facteur généralisé, lorsque l'énergie d'un état propre dépend du temps.

$$\theta_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'. \quad (1.45)$$

Pour expliquer la forme du facteur de phase dynamique, on note que l'évolution temporelle d'un état est formellement exprimée par $|\Psi, t\rangle = U(t, 0) |\Psi, 0\rangle$, L'opérateur d'évolution temporelle come déjà vu s'écrit [22] :

$$U(t, 0) = T \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int_0^t H(t') dt'\right). \quad (1.46)$$

Puisque le théorème adiabatique nous maintient dans le même état propre (dépendant du temps), avec la même valeur propre (dépendante du temps). Donc T ne change pas l'état, et on peut remplacer l'opérateur H dans l'intégrale par la valeur propre $E_n(t)$. Et par conséquent, nous obtenons ainsi une équation différentielle pour le facteur de phase géométrique

$$\frac{d\gamma_n}{dt} = i \langle n(R(t)) | \partial_t | n(R(t)) \rangle. \quad (1.47)$$

Si le vecteur des paramètres $R(t)$ n'a qu'une seule composante, l'intégration de l'équation

précédente donne

$$\gamma_n(t) = i \int_{R_i}^{R_f} \langle n(R(t)) | \partial_R | n(R(t)) \rangle dR. \quad (1.48)$$

Quand le paramètre $R(t)$ revient à la valeur initiale d'après le processus adiabatique (se terminant au temps \mathbf{T}) $R_f = R_i$, puis la phase géométrique s'annule : $\gamma_n(T) = 0$. Cela équivaut au fait que nous ne pouvons pas faire une boucle fermée dans une dimension, la seule façon de revenir au départ est de revenir en arrière.

Cependant, s'il y a plus de composants dans $\mathbf{R}(t)$, la dérivée du temps partiel devient un gradient dans l'espace des paramètres :

$$\frac{\partial \langle n(R(t)) |}{\partial t} = (\nabla_R | n(R(t)) \rangle) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}. \quad (1.49)$$

Si nous reprenons un chemin fermé dans l'espace des paramètres, nous arrivons à l'expression finale du facteur de phase géométrique (Berry) après avoir parcouru adiabatiquement un chemin fermé

$$\gamma_n(C) = i \oint_C \langle n(R) | \nabla_R n(R) \rangle \cdot dR. \quad (1.50)$$

Le terme bra-ket ci-dessus est souvent appelé le potentiel de Berry.

Phase géométrique dans l'espace des paramètres tridimensionnels Lorsque l'hamiltonien dépend du temps à travers trois paramètres, nous pouvons utiliser le théorème de Stokes pour exprimer l'équation (1.51) d'une autre manière [21].

$$\gamma_n(C) = -\text{Im} \int \int_C (\nabla \times \langle n | \nabla_n \rangle) \cdot dS. \quad (1.51)$$

Il est important de noter qu'il y a une analogie intéressante avec l'équation décrivant le flux magnétique en termes de potentiel vectoriel magnétique surgit par l'équation

$$\Phi = \oint_C A \cdot dr = \int_S (\nabla \times A) \cdot dS. \quad (1.52)$$

Le terme $i \langle n | \nabla_n \rangle$, joue le rôle du potentiel vecteur magnétique, tandis que le «flux» signifie la phase géométrique.

De plus, on peut exprimer le facteur de phase géométrique comme une intégrale de surface d'une aire, enfermée C :

$$\gamma_n(C) = - \int \int_C dS \cdot V_n(R). \quad (1.53)$$

1.2.7 Généralisation non adiabatique

Évolution cyclique De nature géométrique, la phase de Berry apparaît également pour des évolutions autres qu'adiabatiques. Aharanov et Anandan [23], ont généralisé l'évolution adiabatique cyclique de Berry, en considérant une évolution cyclique quelconque au cours de laquelle un état reprend au bout du temps T sa valeur initiale à une phase constante près :

$$|\psi(t+T)\rangle = e^{i\alpha} |\psi(t)\rangle. \quad (1.54)$$

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

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} |\tilde{\psi}(t)\rangle. \quad (1.55)$$

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

$$\dot{\alpha}(t) = -\frac{1}{\hbar} \langle \tilde{\psi}(t) | H(t) | \tilde{\psi}(t) \rangle + \langle \tilde{\psi}(t) | i \frac{\partial}{\partial t} | \tilde{\psi}(t) \rangle, \quad (1.56)$$

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

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

$$U(t) = V(t) \exp iMt \quad ; \quad (V(t+T) = V(t)), \quad (1.57)$$

montre que tout état $|n, 0\rangle$ qui, à l'instant $t = 0$ est un état propre de l'opérateur M , est un état cyclique ($V(T) = V(0) = 1$). Mais on peut aussi utiliser l'approche des invariants : Les états

$$|n, t\rangle = V(t) |n, 0\rangle, \quad (1.58)$$

qui peuvent être choisis comme des états de référence $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ dans l'approche d'Aharonov-Anandan, sont les états propres de l'opérateur :

$$I(t) = V(t) M V^+(t), \quad (1.59)$$

qui est invariant, puisqu'il s'écrit aussi

$$I(t) = U(t) M U^+(t). \quad (1.60)$$

Systèmes non hermitiens La généralisation des résultats de Berry aux systèmes régis par des hamiltoniens non hermitiens a été discutée au niveau théorique de différentes manières et calculée pour de nombreux exemples [8, 9, 10, 11]. La seule différence est que cette dernière est complexe tandis que la phase de Berry est réelle.

Systèmes Pseudo-hermitiens Cette phase a été généralisée aux systèmes décrits par des hamiltoniens pseudo-hermitiens de différentes manières et calculée pour de nombreux exemples [12, 13, 14, 15].

La phase de Berry pour le spectre continu La phase géométrique a été généralisée pour le spectre continu⁵. L'analogie de la phase de Berry est établie sous la forme :

$$\gamma^G(k, t) = \int_0^t \langle \delta\varphi(k, t') | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \varphi(k, t') \rangle dt'. \quad (1.61)$$

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

⁵M. Maaamache and Y. Saâdi, *arXiv :0804.4082v1[quant-ph]* (2008).

Chapitre 2

Théorie des invariants

2.1 Introduction

La méthode des invariants de Lewis-Riesenfeld [5, 6, 7] est une technique qui permet d'obtenir un ensemble complet de solutions de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique dépendant du temps en termes d'états propres d'un invariant quadratique. Cet invariant quadratique, l'invariant de Lewis, est construit en utilisant une variable auxiliaire qui satisfait l'équation d'Ermakov [41, 42, 83, 84, 85]. L'idée d'utiliser des invariants pour résoudre des équations est assez ancienne, remontant à S. Lie (1883) [86] qui a montré qu'une équation différentielle du second ordre a le groupe maximal de symétries, si l'équation différentielle (jusqu'au troisième ordre dans la dérivée) et ses coefficients satisfont certaines conditions [87, 88].

Lewis & Riesenfeld (1969) [7] ont utilisé les vecteurs propres de la version quantique d'un invariant quadratique écrit en fonction de la fonction auxiliaire $\rho(t)$ satisfaisant l'équation d'Ermakov pour obtenir les solutions de l'équation de Schrödinger pour un oscillateur harmonique. Dans ce but, une phase supplémentaire dépendante du temps a dû être ajoutée aux fonctions propres afin de satisfaire l'équation de Schrödinger. Ils n'ont pas considéré l'amortissement (ou la masse dépendante du temps) et ils ont supposé que l'invariant quadratique a un spectre discret.

Depuis les fameux résultats présentés par Lewis et Riesenfeld, où ils ont appliqué cette théorie avec succès dans l'étude de deux problèmes concernant les hamiltoniens dépendent explicitement du temps¹, la théorie des invariants a pris un rôle majeur dans la résolution exacte des problèmes des systèmes mécaniques dépendants du temps, et en particulier la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

En général, la recherche d'un tel invariant s'avère toujours une tâche difficile. Cependant, cette méthode s'applique principalement à des problèmes physiques dont l'hamiltonien, qui dépend explicitement du temps, est une combinaison linéaire des générateurs d'une certaine algèbre, comme l'algèbre de Lie par exemple. Son rôle principal, comme il sera montré plus tard, est de contourner la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, qui est une équation différentielle spatio-temporelle parfois très compliquée, et de résoudre l'équation aux valeurs propres relative à l'opérateur invariant où le temps figure comme un simple paramètre.

En effet, cette théorie représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendant du temps. Cette importance de la théorie des invariants est liée au langage mathématique puissant qui la caractérise, et à sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Dans ce chapitre, nous allons présenter en détails l'essentiel de cette méthode selon son contexte original.

2.2 Théorème de Liouville et l'invariant mécanique

En physique, le théorème de Liouville est utilisé en mécanique classique [24], en mécanique quantique [1] et en physique statistique [26, 27, 28]. Ce théorème stipule que le volume de l'espace des phases est constant le long des trajectoires du système, autrement dit ce volume reste constant dans le temps.

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

¹Le premier problème étant celui de l'oscillateur harmonique à fréquence dépendante du temps et le second concerne une particule chargée, placée dans un champ électromagnétique dépendant du temps.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{et} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} ; i = 1 \text{ à } N, \quad (2.1)$$

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

$$\int \rho(p, q, t)dpdq = 1. \quad (2.2)$$

Si nous considérons un élément de volume $d\tau = dpdq$ centré en p, q au temps t , celui-ci deviendra $d\tau' = dp'dq'$ au temps $t + dt$. Les quantités p', q' déduites de p, q en utilisant des transformations canoniques [24] de sorte que l'élément de volume $d\tau'$ est relié à $d\tau$ par la relation

$$d\tau' = |J| d\tau, \quad (2.3)$$

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

$$d\tau' = d\tau, \quad (2.4)$$

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

Si nous différencions l'équation (2.2) par rapport au temps en tenant compte de ce

résultat, nous avons :

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \int \rho(p, q, t) dp dq \\
&= \int \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} \right] dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N, \\
&= \int \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] dq_1 dp_1 \dots dq_N dp_N, \\
&= 0.
\end{aligned} \tag{2.5}$$

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \sum_{i=1}^N \frac{\partial \rho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} = 0, \tag{2.6}$$

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

$$\{A, B\} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i}. \tag{2.7}$$

Avec cette notation, on peut écrire (2.6) sous la forme :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \{H, \rho\}. \tag{2.8}$$

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

Il résulte directement du théorème de Liouville que la fonction de distribution ne peut s'exprimer que par des combinaisons des variables p et q , qui restent constantes lors du déplacement du sous-système considéré comme fermé [24, 25, 26, 27, 28]. Ces combinaisons des variables sont appelées *invariants mécaniques* ou *intégrales du mouvement* ; on sait que ce sont les intégrales premières des équations du mouvement. Par conséquent, on peut dire que la fonction de distribution $\rho(p, q, t)$ qui est une fonction des invariants

mécaniques est elle-même une intégrale de mouvement.

Dans le cas d'un système conservatif, l'énergie est la constante du mouvement la plus utilisée pour bâtir des ensembles à fonction de distribution indépendante du temps. Dans certains cas, lorsque l'on affaire à des mouvements de rotation, on peut aussi considérer le moment cinétique total du sous-système comme constante du mouvement. Dans la plus part des cas on peut prendre la fonction de distribution sous la forme [28]

$$\ln \rho = \alpha_N + \beta E_N(p, q), \quad (2.9)$$

dont les coefficients α_N et β sont constants et $E_N(p, q)$ représente l'énergie du système. Dans ce cas le logarithme de la fonction de distribution est une constante de mouvement [29].

2.3 Equation de Liouville en mécanique quantique

L'analogie quantique de l'équation de Liouville est représenté par l'évolution temporelle d'un opérateur quantique qui est appelée *la matrice densité*. À l'aide le principe de correspondance² qui reliant les objets de la mécanique classique à ceux de la mécanique quantique, on obtient l'équation d'évolution

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\rho, H] \equiv \frac{d\rho}{dt} = 0, \quad (2.10)$$

qui connue sous le nom d'équation de *Liouville-van Neumann*. Dans ce cas ρ représente l'opérateur densité³ (matrice densité) qui est définit par.

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.11)$$

²La quantité $[A, B]$ représente le commutateur quantique et la quantité $\{A, B\}$ représente le crochet de Poisson classique .

³Pour un mélange statistique la matrice densité s'écrit sous la forme : $\hat{\rho}_m = \sum_i^P p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_i^P p_i \rho_i$

Il est important de noter aussi que l'équation de Liouville traduit en fait l'analogie classique de la conservation du nombre d'états en mécanique quantique en fonction de t et elle représente la limite classique de l'équation de *Liouville-Von Neumann*. Comme nous avons obtenu l'interprétation de la fonction de distribution comme un invariant mécanique en mécanique classique, on peut effectivement arriver au résultat analogue qui présente la matrice densité comme un invariant mécanique en mécanique quantique et on peut démontrer que le logarithme de la matrice densité ($\ln \rho$) est un invariant mécanique [29]. On peut citer comme exemple concret de ce résultat, l'entropie de Von Neumann qui est défini par :

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho), \quad (2.12)$$

2.4 Construction d'opérateur invariant

Pour construire des opérateurs invariants sans pour autant connaître l'opérateur d'évolution $U(t)$, nous allons écrire l'hamiltonien du système étudié comme une combinaison linéaire des générateurs hermitiens T_i d'une certaine algèbre de Lie fermée Ξ engendrée par $H(t)$ et de dimension M [30, 89]

$$\Xi = \{T_0, T_1, T_2, \dots, T_M\}, \quad (2.13)$$

et qui satisfaisant la relation de commutation

$$[T_i, T_j] = \sum_{k=0}^M \varepsilon_{ijk} T_k, \quad (2.14)$$

où T_0 désigne l'opérateur identité.

Effectivement, si l'hamiltonien $H(t)$ s'écrit comme une combinaison linéaire des générateurs T_i ;

$$H(t) = \sum_{i=0}^N h_i(t) T_i, \text{ avec } N \leq M, \quad (2.15)$$

où les $h_{ij}(t)$ sont des coefficients dépendants du temps. On peut écrire l'opérateur Hermitien I_0 sous la forme

$$I_0 = \sum_{i=0}^M \xi_i T_i, \quad (2.16)$$

tel que les coefficients ξ_i sont des paramètres arbitraires, et compte tenu de l'équation

$$I(t) = U(t)I_0U^{-1}(t) \quad (2.17)$$

et l'équation de commutation (2.14), l'opérateur invariant dépendant du temps s'écrit sous la forme

$$I(t) = \sum_{j=0}^M \chi_j(t) T_j, \quad (2.18)$$

où les $\chi_j(t)$ sont des coefficients dépendants du temps à déterminer .

Substituons les équations (2.15) et (2.18) dans l'équation d'évolution de *Liouville-van Neumann* (2.10), et compte tenu de l'équation (2.14), on obtient le système d'équations couplées suivant

$$i\hbar \dot{\chi}_k(t) = \sum_{j=0}^M g_{kj} \chi_j, \quad (2.19)$$

tel que

$$g_{kj} = \sum_{i=0}^M h_i(t) \varepsilon_{ijk}. \quad (2.20)$$

Par conséquent, la solution du système d'équation (2.19), nous permettra de trouver la forme de l'invariant $I(t)$. Il est important de noter que la construction de l'opérateur invariant est relié à la forme de l'hamiltonien qui s'écrit sous la base de ces générateurs.

2.5 Relation équation de Schrödinger et théorie des invariants

Dans le but de clarifier cette relation d'une manière simple et formelle on considère un système physique décrit par un hamiltonien $H(t)$ dépendant explicitement du temps et on suppose l'existence d'un autre opérateur hermitien⁴ qui dépend explicitement du temps $I(t)$. L'opérateur $I(t)$ est invariant lorsqu'il satisfait la condition

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0, \quad (2.21)$$

tel que

$$I^+(t) = I(t). \quad (2.22)$$

La multiplication de l'équation (2.21) par le ket $|\psi(t)\rangle$ à droite et l'utilisation de l'équation de Schrödinger, nous permettra de déduire une relation importante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I|\psi(t)\rangle) = H(I|\psi(t)\rangle). \quad (2.23)$$

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

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

⁴Cette théorie a été généralisée pour les systèmes non hermitiens par J. C. Garrison et *al* en 1988.

nécessaires à spécifier les états propres de l'invariant

$$I(t) |\lambda, n\rangle = \lambda |\lambda, n\rangle, \quad (2.24)$$

$$\langle \lambda', n' | \lambda, n \rangle = \delta_{\lambda'\lambda} \delta_{n'n}. \quad (2.25)$$

Les valeurs propres λ sont réels et indépendantes du temps.

La différentiation de l'équation (2.24) conduit à

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, n\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle. \quad (2.26)$$

En multipliant l'équation (2.21) par le ket $|\lambda, n\rangle$ on obtient

$$i\hbar \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle + IH |\lambda, n\rangle - HI |\lambda, n\rangle = 0. \quad (2.27)$$

Le produit scalaire de l'équation (2.27) par le vecteur d'état $\langle \lambda', n' |$

$$i\hbar \langle \lambda', n' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \lambda', n' | H |\lambda, n\rangle = 0, \quad (2.28)$$

implique que

$$\langle \lambda, n' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle = 0. \quad (2.29)$$

le produit scalaire de l'équation (2.26) avec le ket $|\lambda, n\rangle$ conduit à une expression qui exprime que la valeur propre de l'invariant est indépendante du temps :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \lambda, n | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle = 0. \quad (2.30)$$

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

Dans le but de chercher la relation qui existe entre les états propres de l'invariant I et les solutions de l'équation de Schrödinger, on écrit tout d'abord l'équation d'évolution

de l'état $|\lambda, n\rangle$, en utilisant les deux équations (2.26) et (2.30) :

$$(\lambda - I) \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle = \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle, \quad (2.31)$$

et on élimine le terme $\langle \lambda', n' | \frac{\partial I}{\partial t} |\lambda, n\rangle$ en utilisant le produit scalaire de $|\lambda', n'\rangle$ par l'équation (2.28), on obtient finalement

$$i\hbar (\lambda - \lambda') \langle \lambda', n' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', n' | H |\lambda, n\rangle. \quad (2.32)$$

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

$$i\hbar \langle \lambda', n' | \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, n\rangle = \langle \lambda', n' | H |\lambda, n\rangle. \quad (2.33)$$

Remarquons que l'équation (2.32) n'implique pas que

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

Si dans l'équation (2.33) on prend $\lambda' = \lambda$ (bien que $\lambda' \neq \lambda$), dans ce cas on déduit immédiatement que l'état $|\lambda, n\rangle$ satisfait l'équation de Schrödinger, c'est-à-dire l'état propre de l'invariant représente une solution particulière du vecteur d'état de Schrödinger $|\psi(t)\rangle$.

La phase associé aux états propres $|\lambda, n\rangle$ n'est pas fixé par des conditions initiales, on peut la choisir en multipliant les états $|\lambda, n\rangle$ par des facteurs de phase arbitraires dépendants du temps. En effet on définit un nouveau vecteur d'état de $I(t)$ relié par le vecteur d'état initial par une transformation du gauge dépendante du temps.

$$|\lambda, n\rangle_\alpha = \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n\rangle, \quad (2.35)$$

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

$$I |\lambda, n\rangle_\alpha = I \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n\rangle = \lambda \exp(i\alpha_{\lambda n}(t)) |\lambda, n\rangle, \quad (2.36)$$

tel que

$${}_\alpha \langle \lambda', n' | \lambda, n \rangle_\alpha = \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{n' n}. \quad (2.37)$$

Pour $\lambda' \neq \lambda$, l'équation (2.33) reste vraie pour les éléments de matrice construits par les nouveaux vecteurs propres. Chacun de ces vecteurs propres satisfait l'équation de Schrödinger si on choisit les phases $\alpha_{\lambda n}(t)$ de telle sorte que l'équation (2.33) soit vérifiée pour $\lambda' = \lambda$. Ce qui équivaut à l'équation différentielle du premier ordre pour $\alpha_{\lambda n}(t)$, provenant de l'injection de (2.35) dans (2.21)

$$\hbar \delta_{n'n} \dot{\alpha}_{\lambda n}(t) = \langle \lambda, n' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, n \rangle. \quad (2.38)$$

Pour satisfaire cette dernière équation, les états $|\lambda, n\rangle$ doivent être choisis de telle sorte que le membre droit de l'équation (2.38) s'annule pour le cas $n' \neq n$. Cette diagonalisation est toujours possible car l'opérateur $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H)$ est hermitien. Et dans ce cas l'expression de la phase $\alpha_{\lambda n}(t)$ s'écrit sous la forme

$$\hbar \dot{\alpha}_{\lambda n}(t) = \langle \lambda, n | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, n \rangle. \quad (2.39)$$

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

2.6 Application : Oscillateur harmonique avec masse et fréquence variables

Les oscillateurs harmoniques sont les éléments constitutifs de plusieurs branches de la physique, de la mécanique classique aux systèmes de mécanique quantique. En particulier, pour les systèmes de mécanique quantique, des fonctions d'onde ont été reconstruites comme c'est le cas pour les interactions ion-laser [31] et pour les champs quantifiés dans les cavités [32]. Des extensions des oscillateurs harmoniques simples aux oscillateurs harmoniques dépendants du temps peuvent être modélisés comme des champs quantifiés se propageant dans des milieux diélectriques [33] et interactions ion-laser [34], où la dépendance temporelle est nécessaire pour piéger les ions. Les oscillateurs harmoniques dépendant du temps ont été largement étudiés et plusieurs invariants ont été obtenus [35, 36]. Des méthodes algébriques pour obtenir l'opérateur d'évolution ont également été montrées [37]. Ils ont été résolus sous diverses formes tels que la masse dépendante du temps [37, 38], la fréquence dépendante du temps [39, 40] et les applications de la méthode des invariants ont été étudiées dans différents régimes [41].

Pour illustrer le formalisme de la théorie des invariants, on donne aux lecteurs un exemple simple et descriptif concernant un système hamiltonien décrit par l'oscillateur harmonique dépendant du temps à une dimension, et pour cette raison on considère l'équation de Schrödinger dépendant du temps suivante

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\Psi(t)\rangle, \quad (2.40)$$

tel que

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}m(t)\omega^2(t)q^2, \quad (2.41)$$

où x est une coordonnée canonique, p son moment conjugué, la pulsation $\omega(t)$ et la masse

$m(t)$ sont des fonctions arbitraires dépendantes du temps.

Les équations canoniques du mouvement sont données par les équations de Hamilton

$$\dot{q} = \frac{1}{i\hbar}[q, H] = \frac{1}{m(t)}p, \quad (2.42)$$

$$\dot{p} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = -m(t)\omega^2(t)q. \quad (2.43)$$

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

$$I(q, p, t) = \mu_1(t)p^2 + \mu_2(t)q^2 + \mu_3(t)(qp + pq), \quad (2.44)$$

où $\mu_1(t), \mu_2(t), \mu_3(t)$ sont des fonctions réelles et différentielles dépendantes du temps.

Substituons les deux équations (2.41) et (2.44) dans l'équation (2.21), nous obtenons le système d'équations couplées suivant :

$$\dot{\mu}_1(t) = -\frac{2}{m(t)}\mu_3(t), \quad (2.45)$$

$$\dot{\mu}_2(t) = 2m(t)\omega^2(t)\mu_3(t), \quad (2.46)$$

$$\dot{\mu}_3(t) = -\frac{1}{m(t)}\mu_2(t) + m(t)\omega^2(t)\mu_1(t). \quad (2.47)$$

Ce système peut être simplifié en posant $\mu_1(t) = \rho^2$, où ρ est la solution de l'équation auxiliaire de Pinney [41, 42, 83, 84, 85]

$$\ddot{\rho} + \frac{\dot{m}}{m}\dot{\rho} + \rho\omega^2 = \frac{1}{m^2\rho^3}. \quad (2.48)$$

En utilisant les équations (2.45), (2.46) et (2.47) on arrive à déterminer

$$\mu_2(t) = \frac{1}{\rho^2} \left(1 + m^2 \rho^2 \dot{\rho}^2 \right), \quad (2.49)$$

$$\mu_3(t) = -m\rho\dot{\rho}. \quad (2.50)$$

Ainsi, l'invariant s'écrit sous la forme :

$$I(t) = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{q}{\rho} \right)^2 + \left(\rho\dot{q} - \dot{\rho}q \right)^2 \right]. \quad (2.51)$$

Pour obtenir les fonctions propres de $I(t)$, considérons la transformation unitaire :

$$\phi'_n(q, t) = U \phi_n(q, t), \quad (2.52)$$

avec

$$U = \exp \left[-i \frac{m\dot{\rho}}{2\hbar\rho} q^2 \right]. \quad (2.53)$$

Et par conséquent, l'équation aux valeurs propre de l'invariant devient :

$$I' \phi'_n(q, t) = \lambda_n \phi'_n(q, t), \quad (2.54)$$

tel que le nouveau invariant transformé est donné par l'expression

$$I' = UIU^+ = \frac{1}{2} \left[\rho^2 p^2 + \frac{q^2}{\rho^2} \right]. \quad (2.55)$$

Si nous posons $q/\rho = \xi$, dans ce cas l'équation (2.55) est écrit comme suit

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\xi^2}{2} \right] \varphi_n(\xi) = \lambda_n \varphi_n(\xi), \quad (2.56)$$

avec

$$\phi'_n(q, t) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} \varphi_n(\xi). \quad (2.57)$$

Le facteur $\frac{1}{\sqrt{\rho}}$ est introduit dans l'équation (2.57) pour garantir la condition de normalisation

$$\int \phi_n'^*(q, t) \phi'_n(q, t) dq = \int \varphi_n^*(\xi) \varphi_n(\xi) d\xi = 1. \quad (2.58)$$

La solution de l'équation (2.56) est

$$\varphi_n(\xi) = \left[\frac{1}{n! 2^n \sqrt{\pi \hbar}} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{\xi^2}{2\hbar} \right] H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{1/2} \xi \right], \quad (2.59)$$

où $\lambda_n = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right)$, et H_n le polynôme d'Hermite d'ordre n .

$$\phi_n(q, t) = \left[\frac{1}{n! 2^n \rho \sqrt{\pi \hbar}} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}}{\rho} + \frac{i}{m\rho^2} \right) q^2 \right] H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{q}{\rho} \right) \right]. \quad (2.60)$$

Il nous reste qu'à trouver la phase $\alpha_n(t)$, pour cela, on utilise l'équation (2.39), puis on passe de la fonction d'état $\Phi_n(q, t)$ à $\Phi'_n(q, t)$ par la transformation inverse, on obtient

$$\hbar \dot{\alpha}(t) = \left\langle \phi'_n(q, t) \left| \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \frac{\dot{\rho}}{\rho} q \frac{\partial}{\partial q} + i\hbar \frac{\dot{\rho}}{2\rho} - \frac{I'}{m\rho^2} \right] \right| \Phi'_n \right\rangle, \quad (2.61)$$

où, on utilise l'équation auxiliaire (2.48) pour éliminer ω^2 de H . Ensuite, en substituant l'équation (2.57) dans équation (2.61), on obtient

$$\hbar \dot{\alpha}(t) = \langle \varphi_n | \left[-\frac{I'}{m\rho^2} \right] | \varphi_n \rangle. \quad (2.62)$$

En utilisant l'équation (2.54) et la normalisation de φ_n on trouve

$$\alpha(t) = -\left(n + \frac{1}{2}\right) \int_0^t \frac{dt'}{m\rho^2}. \quad (2.63)$$

Enfin la solution générale de l'équation de Schrödinger est prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} \psi(q, t) = & \sum_n C_n \left[\frac{1}{n! 2^n \rho \sqrt{\pi \hbar}} \right]^{1/2} \\ & \exp \left[-\frac{im}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}}{\rho} + \frac{i}{m\rho^2} \right) q^2 - i \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{dt'}{m\rho^2} \right] \\ & H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{1/2} \left(\frac{q}{\rho} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Chapitre 3

Dynamique quantique d'un oscillateur couplé dépendant du temps

3.1 Introduction

Depuis les travaux pionniers de Lewis [5, 6, 7], le comportement quantique de l'oscillateur harmonique dépendant du temps a suscité un intérêt considérable dans la littérature, car il offre des modèles qu'on peut solutionner avec exactitude dans les différents domaines de physique. Il existe divers types des oscillateurs harmoniques dépendants du temps tels que l'oscillateur de Caldirola-Kanai [43, 44] et l'oscillateur paramétrique [45]. L'oscillateur harmonique à plusieurs dimensions a joué un rôle important, par exemple, dans la structure nucléaire en couches et les modèles de confinement des quarks. Selon les progrès de la recherche connus pour ces systèmes, une question pertinente a été posée de façon naturelle : Que feriez-t-il si deux oscillateurs harmoniques sont couplés par un potentiels additif? L'étude de ce problème a été initiée par Kim et al.[46, 47, 48, 49, 50, 51]. Ils ont estimé deux oscillateurs harmoniques qui sont mutuellement couplés de façon que le potentiel qui en résulte devient $V(x_1, x_2) = (c_1x_1^2 + c_2x_2^2 + c_3x_1x_2)$, et ils ont déterminé la

matrice de densité correspondant rigoureusement afin d'établir la fonction de Wigner et certains d'autres fonctions utiles en physique. Il y a plusieurs systèmes physiques décrits par des oscillateurs harmoniques couplés, comme le modèle de Lee en théorie quantique des champs [52], le modèle de transformation de Bogoliubov dans la supraconductivité [53], et certains modèles en physique moléculaire [54].

Les modèles d'oscillateurs couplés ont été revisités et largement utilisés dans l'analyse de divers systèmes mécaniques. Par exemple, et non limitativement, le traitement quantique d'oscillateurs couplés dépendant du temps associés à un amplificateur paramétrique et un convertisseur de fréquence a été étudié et étendu à l'interaction avec un atome à deux niveaux [55, 56]. D'autre part, le mouvement d'une particule chargée en présence d'un champ magnétique variant dans le temps a fait l'objet de plusieurs études par le modèle d'oscillateur couplé dépendant du temps [57, 58, 59]. Les circuits électriques sont des systèmes artificiels pour la manipulation et le transport de l'énergie. Les circuits électroniques nano-mésoscopiques à deux dimensions ont été modélisés par un oscillateur couplé dépendant du temps [60, 61]. De même, les systèmes opto-mécaniques couplés [62] et l'effet Aharonov-Bohm [63] ont été largement étudiés dans ce contexte. Par ailleurs, la dynamique de l'intrication a été bien investie par un oscillateur harmonique couplé [64].

L'importance de ce modèle dans la physique classique et la physique quantique, nous a motivé de l'étudier dans le domaine des systèmes dépendants du temps en utilisant la méthode de invariants. Une méthode de transformation unitaire sera également adoptée afin de simplifier le problème. Les fonctions d'onde exactes pour l'oscillateur couplé dépendant du temps seront dérivées en utilisant les états propres de l'opérateur invariant.

3.2 Invariant classique du système

Nous nous intéressons à l'étude de la dynamique quantique de l'oscillateur couplé dépendant du temps, il peut être instructif de trouver l'invariant classique avant de pro-

céder à l'étude quantique du système. Pour cette raison, on cherche l'invariant classique comme une étape préliminaire dans un premier temps.

L'hamiltonien classique de l'oscillateur couplé dépendant du temps que nous considérons comme intéressé par ce travail est [16]

$$H(t) = \frac{P_1^2}{2m_1(t)} + \frac{P_2^2}{2m_2(t)} + \frac{1}{2} (c_1(t)X_1^2 + c_2(t)X_2^2 + c_3(t)X_1X_2), \quad (3.1)$$

où les paramètres $m_1(t)$, $m_2(t)$, $c_1(t)$, $c_2(t)$, et $c_3(t)$ sont des fonctions arbitraires dépendantes du temps. Notons que la relation pour les crochets de Poisson entre les variables canoniques (X_i, P_j) dans l'espace des phases est donnée par

$$\{X_i, P_j\} = \delta_{ij}(i, j = 1, 2), \quad (3.2)$$

$$\{X_i, X_j\} = \{P_i, P_j\} = 0. \quad (3.3)$$

Il est évident que selon le choix explicite des paramètres dépendant du temps, l'hamiltonien dans l'équation (3.1) peut être utilisé pour décrire différents systèmes réels différents [65, 66, 67]. D'une part, un système oscillatoire couplé obéissant à une géométrie non commutative a également été étudié en utilisant cet hamiltonien [68].

Selon les deux relations de base de Hamilton

$$\dot{X}_i = \partial H / \partial P_i, \quad (3.4)$$

$$\dot{P}_i = \partial H / \partial X_i, \quad (3.5)$$

nous pouvons facilement dériver les équations classiques du mouvement comme suit

$$m_1(t) \ddot{X}_1 + \dot{m}_1(t) \dot{X}_1 + c_1(t) X_1 + \frac{1}{2} c_3(t) X_2 = 0, \quad (3.6)$$

$$m_2(t) \ddot{X}_2 + \dot{m}_2(t) \dot{X}_2 + c_2(t) X_2 + \frac{1}{2} c_3(t) X_1 = 0. \quad (3.7)$$

Pour trouver l'invariant classique du système, supposons que son expression soit de la forme

$$I(t) = \frac{1}{2}\alpha_1(t)P_1^2 + \frac{1}{2}\alpha_2(t)P_2^2 + \beta_1(t)X_1P_1 + \beta_2(t)X_2P_2 + \frac{1}{2}\gamma_1(t)X_1^2 + \frac{1}{2}\gamma_2(t)X_2^2 + \frac{1}{2}\eta(t)X_1X_2, \quad (3.8)$$

où $\alpha_i(t), \beta_i(t), \gamma_i(t)$ ($i = 1, 2$) et $\eta(t)$ sont des fonctions réelles et différentiables, qui devront être déterminées ultérieurement avec la condition $\alpha_i(t)\gamma_i(t) - \beta_i^2(t) = cst$. Pour calculer $I(t)$, en utilisant la condition selon laquelle la dérivée temporelle de $I(t)$ doit être nulle :

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \sum_{i=1}^2 \left[\frac{\partial I}{\partial X_i} \frac{\partial H}{\partial P_i} - \frac{\partial I}{\partial P_i} \frac{\partial H}{\partial X_i} \right] = 0. \quad (3.9)$$

En insérant les équations (3.1) et (3.8) dans l'équation (3.9), nous obtenons le système des équations suivantes :

$$\dot{\alpha}_1(t) = \frac{-2\beta_1(t)}{m_1(t)}, \quad (3.10)$$

$$\dot{\alpha}_2(t) = \frac{-2\beta_2(t)}{m_2(t)}, \quad (3.11)$$

$$\dot{\beta}_1(t) = 2c_1(t)\alpha_1(t) - \frac{\gamma_1(t)}{m_1(t)}, \quad (3.12)$$

$$\dot{\beta}_2(t) = 2c_2(t)\alpha_2(t) - \frac{\gamma_2(t)}{m_2(t)}, \quad (3.13)$$

$$\dot{\gamma}_1(t) = 2c_1(t)\beta_1(t), \quad (3.14)$$

$$\dot{\gamma}_2(t) = 2c_2(t)\beta_2(t), \quad (3.15)$$

$$\dot{\eta}(t) = c_3(t) [\beta_1(t) + \beta_2(t)]. \quad (3.16)$$

Alors, la résolution du système d'équations (3.10) - (3.16), nous donne explicitement la forme des coefficients de l'invariant sous la forme intégrable suivante :

$$\alpha_1(t) = \frac{1}{m_1(t)}, \quad (3.17)$$

$$\alpha_2(t) = \frac{1}{m_2(t)}, \quad (3.18)$$

$$\beta_1(t) = \frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)}, \quad (3.19)$$

$$\beta_2(t) = \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)}, \quad (3.20)$$

$$\gamma_1(t) = \int_0^t \frac{c_1(t)\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} dt, \quad (3.21)$$

$$\gamma_2(t) = \int_0^t \frac{c_2(t)\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} dt, \quad (3.22)$$

$$\eta(t) = \int_0^t c_3(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \right) dt. \quad (3.23)$$

Insérons les équations (3.17)-(3-23) dans l'équation (3.7), nous obtenons l'expression de l'opérateur invariant classique sous la forme

$$\begin{aligned} I(t) = & \frac{1}{2m_1(t)} P_1^2 + \frac{1}{2m_2(t)} P_2^2 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} X_1 P_1 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} X_2 P_2 + \frac{1}{2} \left[\int_0^t \frac{c_1(t)\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} dt \right] X_1^2 \\ & + \frac{1}{2} \left[\int_0^t \frac{c_2(t)\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} dt \right] X_2^2 + \frac{1}{2} \left[\int_0^t c_3(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \right) dt \right] X_1 X_2. \quad (3.24) \end{aligned}$$

Ceci n'est pas seulement utile dans l'analyse dynamique dans le domaine classique [69, 70], mais il est également étroitement lié à la dynamique quantique du système.

3.3 Invariant quantique et opérateurs d'échelle

Sur la base du développement de la section précédente, il est maintenant simple d'obtenir l'invariant quantique du système. Pour cela, en remplaçant les variables canoniques de l'invariant classique du système par des opérateurs quantiques correspondants, on obtient l'opérateur invariant quantique [69, 70]

$$\begin{aligned}
\hat{I}(t) = & \frac{1}{2m_1(t)}\hat{P}_1^2 + \frac{1}{2m_2(t)}\hat{P}_2^2 + \frac{\dot{m}_1(t)}{4m_1(t)}\left(\hat{X}_1\hat{P}_1 + \hat{P}_1\hat{X}_1\right) + \frac{\dot{m}_2(t)}{4m_2(t)}\left(\hat{X}_2\hat{P}_2 + \hat{P}_2\hat{X}_2\right) \\
& + \frac{1}{2}\left[\int_0^t \frac{c_1(t)\dot{m}_1(t)}{m_1(t)}dt\right]\hat{X}_1^2 + \frac{1}{2}\left[\int_0^t \frac{c_2(t)\dot{m}_2(t)}{m_2(t)}dt\right]\hat{X}_2^2 \\
& + \frac{1}{2}\left[\int_0^t c_3(t)\left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)}\right)dt\right]\hat{X}_1\hat{X}_2.
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Utilisant la relation de commutation dans la mécanique quantique

$$[\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}(i, j = 1, 2), \tag{3.26}$$

on peut simplement vérifier que l'invariant \hat{I} satisfait l'équation de Liouville-von Neumann

$$\frac{d\hat{I}}{dt} = \frac{\partial\hat{I}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{I}, \hat{H}] = 0. \tag{3.27}$$

Concernant l'investigation des valeurs propres et des états propres du système, nous pouvons adopter une méthode algébrique liée à l'opérateur quantique \hat{I} et aux opérateurs d'échelle correspondants. Grâce à cela, il peut être possible d'obtenir les solutions quantiques et d'élucider les propriétés quantiques sous-jacentes du système. Afin d'obtenir les fonctions propres et les valeurs propres de l'opérateur invariant, il est utile de réexprimer l'équation (3.25) en termes d'opérateurs de création et d'annihilation. Pour ce faire, nous définissons les opérateurs d'annihilation et de création canoniques dépendant du temps

\hat{a}_i et \hat{a}_i^\dagger respectivement, comme

$$\begin{aligned} \hat{a}_1 = & \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_1}} \left\{ \omega_1 \sqrt{m_1(t)} \left(\hat{X}_1 \cos \frac{\theta}{2} - \hat{X}_2 \sin \frac{\theta}{2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{i}{\sqrt{m_1(t)}} \left[\left(\hat{P}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} \hat{X}_1 \right) \cos \frac{\theta}{2} - \left(\hat{P}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \hat{X}_2 \right) \sin \frac{\theta}{2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_1^\dagger = & \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_1}} \left\{ \omega_1 \sqrt{m_1(t)} \left(\hat{X}_1 \cos \frac{\theta}{2} - \hat{X}_2 \sin \frac{\theta}{2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{i}{\sqrt{m_1(t)}} \left[\left(\hat{P}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} \hat{X}_1 \right) \cos \frac{\theta}{2} - \left(\hat{P}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \hat{X}_2 \right) \sin \frac{\theta}{2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_2 = & \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_2}} \left\{ \omega_2 \sqrt{m_2(t)} \left(\hat{X}_1 \sin \frac{\theta}{2} + \hat{X}_2 \cos \frac{\theta}{2} \right) \right. \\ & \left. + \frac{i}{\sqrt{m_2(t)}} \left[\left(\hat{P}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} \hat{X}_1 \right) \sin \frac{\theta}{2} + \left(\hat{P}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \hat{X}_2 \right) \cos \frac{\theta}{2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \hat{a}_2^\dagger = & \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_2}} \left\{ \omega_2 \sqrt{m_2(t)} \left(\hat{X}_1 \sin \frac{\theta}{2} + \hat{X}_2 \cos \frac{\theta}{2} \right) \right. \\ & \left. - \frac{i}{\sqrt{m_2(t)}} \left[\left(\hat{P}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} \hat{X}_1 \right) \sin \frac{\theta}{2} + \left(\hat{P}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \hat{X}_2 \right) \cos \frac{\theta}{2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

où ω_1 et ω_2 sont des fréquences modifiées qui sont données par

$$\begin{aligned} \omega_1^2 = & \left(\frac{\int [c_1 \dot{m}_1 / m_1] dt}{m_1} - \frac{\dot{m}_1^2}{4m_1^2} \right) \cos^2 \frac{\theta}{2} + \left(\frac{\int [c_2 \dot{m}_2 / m_2] dt}{m_2} - \frac{\dot{m}_2^2}{4m_2^2} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ & + \frac{\int c_3 [\dot{m}_1 / (2m_1) + \dot{m}_2 / (2m_2)] dt}{2[m_1 m_2]^{1/2}} \sin \theta, \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \omega_2^2 = & \left(\frac{\int [c_1 \dot{m}_1 / m_1] dt}{m_1} - \frac{\dot{m}_1^2}{4m_1^2} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2} + \left(\frac{\int [c_2 \dot{m}_2 / m_2] dt}{m_2} - \frac{\dot{m}_2^2}{4m_2^2} \right) \cos^2 \frac{\theta}{2} \\ & - \frac{\int c_3 [\dot{m}_1 / (2m_1) + \dot{m}_2 / (2m_2)] dt}{2[m_1 m_2]^{1/2}} \sin \theta, \end{aligned} \quad (3.33)$$

avec

$$\tan \theta = \frac{\int c_3 [\dot{m}_1/(2m_1) + \dot{m}_2/(2m_2)] dt}{[m_1 m_2]^{1/2} \left[\frac{1}{m_1} \int [c_1 \dot{m}_1/m_1] dt - \dot{m}_1^2/(4m_1^2) - \frac{1}{m_2} \int [c_2 \dot{m}_2/m_2] dt + \dot{m}_2^2/(4m_2^2) \right]}. \quad (3.34)$$

Il est important de noter que ces opérateurs \hat{a}_i et \hat{a}_i^\dagger obéissent aux propriétés habituelles des opérateurs de création et d'annihilation, y compris la règle de commutation canonique du boson

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_1^\dagger] = 1, \quad (3.35)$$

$$[\hat{a}_2, \hat{a}_2^\dagger] = 1. \quad (3.36)$$

Maintenant, l'opérateur invariant (3.25), peut être réécrit en termes de \hat{a}_i et \hat{a}_i^\dagger comme

$$\hat{I}(t) = \hbar\omega_1 \left(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \frac{1}{2} \right). \quad (3.37)$$

Ainsi, nous avons découplé l'opérateur invariant associé au système original. Ce découplage peut être très utile pour développer la théorie quantique ultérieure du système.

3.4 Valeurs propres et fonctions d'onde

Au fait que l'équation (3.37) est représenté en termes d'opérateurs d'échelle, les états propres de l'opérateur invariant sont les mêmes que les états propres $|n_1, n_2, t\rangle$ de $\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1$ et $\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2$, qui suivent les relations

$$\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 |n_1, n_2, t\rangle = n_1 |n_1, n_2, t\rangle, \quad (3.38)$$

$$\hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 |n_1, n_2, t\rangle = n_2 |n_1, n_2, t\rangle. \quad (3.39)$$

Selon les états du point zéro (état du vide) $|0, 0, t\rangle$, on peut exprimer les états normalisés $|n_1, n_2, t\rangle$ sous la forme

$$|n_1, n_2, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} |0, 0, t\rangle, \quad (3.40)$$

$$\langle n_1, n_2, t | n'_1, n'_2, t \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2}. \quad (3.41)$$

Sur cette base, le spectre des valeurs propres de \hat{I} peut être écrit comme suit

$$\lambda_{n_1, n_2} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right). \quad (3.42)$$

Maintenant, pour simplifier le problème, nous introduisons une transformation linéaire des opérateurs canoniques (\hat{X}_i, \hat{P}_i) en un nouvel ensemble de variables $(\hat{Q}_i, \hat{\pi}_i)$, tel que

$$\begin{pmatrix} \hat{X}_1 \\ \hat{X}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{m_1(t)}} \cos \frac{\theta(t)}{2} & \frac{1}{\sqrt{m_2(t)}} \sin \frac{\theta(t)}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{m_1(t)}} \sin \frac{\theta(t)}{2} & \frac{1}{\sqrt{m_2(t)}} \cos \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{Q}_1 \\ \hat{Q}_2 \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{P}_1 \\ \hat{P}_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sqrt{m_1(t)} \cos \frac{\theta(t)}{2} & \sqrt{m_2(t)} \sin \frac{\theta(t)}{2} \\ -\sqrt{m_1(t)} \sin \frac{\theta(t)}{2} & \sqrt{m_2(t)} \cos \frac{\theta(t)}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\pi}_1 \\ \hat{\pi}_2 \end{pmatrix} \\ &- \begin{pmatrix} \frac{\dot{m}_1}{2m_1} & 0 \\ 0 & \frac{\dot{m}_2}{2m_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{X}_1 \\ \hat{X}_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.44)$$

Ensuite, nous pouvons exprimer les équations (3.28)-(3.31) sous des formes simples en termes de \hat{Q}_i et $\hat{\pi}_i$ comme

$$\hat{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_1(t)}} [\omega_1(t) \hat{Q}_1 + i\hat{\pi}_1], \quad (3.45)$$

$$\hat{a}_1^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_1(t)}} [\omega_1(t) \hat{Q}_1 - i\hat{\pi}_1], \quad (3.46)$$

$$\hat{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_2(t)}}[\omega_2(t)\hat{Q}_2 + i\hat{\pi}_2], \quad (3.47)$$

$$\hat{a}_2^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_2(t)}}[\omega_2(t)\hat{Q}_2 - i\hat{\pi}_2]. \quad (3.48)$$

Les fonctions d'onde de la représentation \hat{X} , sont reliées à celles de la représentation \hat{Q} par la transformation unitaire de la forme

$$|\Psi_{n_1 n_2}(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_{n_1 n_2}(t)\rangle, \quad (3.49)$$

où $\hat{U}(t)$ est un opérateur unitaire dépendant du temps, qui est donné par

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_1(t)\hat{U}_2(t)\hat{U}_3(t)\hat{U}_4(t), \quad (3.50)$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{U}_1(t) &= \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (\hat{P}_1 \hat{X}_1 + \hat{X}_1 \hat{P}_1) \ln \left(\frac{m_1(t)}{m_2(t)} \right)^{1/4} \right] \\ &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (\hat{P}_2 \hat{X}_2 + \hat{X}_2 \hat{P}_2) \ln \left(\frac{m_2(t)}{m_1(t)} \right)^{1/4} \right], \end{aligned} \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} \hat{U}_2(t) &= \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (\hat{P}_1 \hat{X}_1 + \hat{X}_1 \hat{P}_1) \ln \sqrt[4]{m_1(t)m_2(t)} \right] \\ &\times \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (\hat{P}_2 \hat{X}_2 + \hat{X}_2 \hat{P}_2) \ln \sqrt[4]{m_1(t)m_2(t)} \right], \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\hat{U}_3(t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{2} (\hat{P}_2 \hat{X}_1 - \hat{P}_1 \hat{X}_2) \right], \quad (3.53)$$

$$\hat{U}_4(t) = \exp \left[-\frac{i}{4\hbar} \left(\frac{\dot{m}_1}{m_1} \hat{X}_1^2 + \frac{\dot{m}_2}{m_2} \hat{X}_2^2 \right) \right]. \quad (3.54)$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi_{n_1 n_2}(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi_{n_1 n_2}(t)\rangle, \quad (3.55)$$

peuvent s'écrire sous la forme

$$|\Psi_{n_1 n_2}(t)\rangle = e^{i\alpha_{n_1 n_2}(t)} |n_1, n_2, t\rangle, \quad (3.56)$$

où le facteur des phases $\alpha_{n_1 n_2}(t)$ vérifie l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_{n_1, n_2}(t) = \frac{1}{\hbar} \langle n_1, n_2, t | \left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) | n_1, n_2, t \rangle. \quad (3.57)$$

En résolvant l'équation (3.57) dans l'espace de configuration, on confirme facilement que les phases sont données par

$$\alpha_{n_1, n_2}(t) = \omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) t + \omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) t. \quad (3.58)$$

La dynamique quantique du système oscillatoire couplé dépendant du temps, décrit jusqu'à présent, peut être largement utilisée pour caractériser les propriétés quantiques des divers systèmes physiques associés.

3.5 Application et discussion

Le modèle théorique développé jusqu'à présent est applicable pour élucider plusieurs aspects quantiques du système tels que les fluctuations des variables canoniques, les valeurs moyennes d'énergie quantique, la fonction de distribution de Wigner, l'analyse des propriétés de cohérence, l'intrication entre les deux sous-systèmes couplés, etc.

Maintenant, nous appliquons la théorie quantique du système à l'évaluation des fluctuations et des produits d'incertitude pertinents à titre d'exemple pour un cas particulier, et nous montrons que ces résultats correspondent aux résultats des recherches précédentes [60] rapportées pour un circuit électronique mésoscopique à 2D. Pour cela, on considère le cas où les deux masses $m_i(t)$ et les trois paramètres $c_i(t)$ augmentent exponentiellement

avec le temps

$$m_i(t) = m_{0,i}e^{\delta t} \quad (i = 1, 2) \quad , \quad c_i(t) = c_{0,i}e^{\delta t} \quad (i = 1, 2, 3), \quad (3.59)$$

où δ , $m_{0,i}$ et $c_{0,i}$ sont des constantes initiales.

Les fluctuations de la paire de variables de position et des variables de moment conjugué canoniques du système peuvent être définies respectivement comme

$$(\Delta \hat{X}_i)^2 = \langle \Psi_{n_1, n_2}(t) | \hat{X}_i^2 | \Psi_{n_1, n_2}(t) \rangle - (\langle \Psi_{n_1, n_2}(t) | \hat{X}_i | \Psi_{n_1, n_2}(t) \rangle)^2, \quad (3.60)$$

$$(\Delta \hat{P}_i)^2 = \langle \Psi_{n_1, n_2}(t) | \hat{P}_i^2 | \Psi_{n_1, n_2}(t) \rangle - (\langle \Psi_{n_1, n_2}(t) | \hat{P}_i | \Psi_{n_1, n_2}(t) \rangle)^2. \quad (3.61)$$

Si nous prenons le cas de l'état fondamental, où $n_1 = n_2 = 0$, (pour la simplicité). Nous avons ensuite pu évaluer les équations (3.60) et (3.61) en utilisant l'équation (3.49). Par conséquent nous obtenons

$$(\Delta \hat{X}_1)^2 = \frac{e^{-\delta t}}{m_{0,1}} \left(\frac{\cos^2 \frac{\theta}{2}}{\omega_1} + \frac{\sin^2 \frac{\theta}{2}}{\omega_2} \right) \frac{\hbar}{2}, \quad (3.62)$$

$$(\Delta \hat{X}_2)^2 = \frac{e^{-\delta t}}{m_{0,2}} \left(\frac{\sin^2 \frac{\theta}{2}}{\omega_1} + \frac{\cos^2 \frac{\theta}{2}}{\omega_2} \right) \frac{\hbar}{2}, \quad (3.63)$$

$$(\Delta \hat{P}_1)^2 = m_{0,1}e^{\delta t} \left[\omega_1 \left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_1^2} \right) \cos^2 \frac{\theta}{2} + \omega_2 \left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_2^2} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2} \right] \frac{\hbar}{2}, \quad (3.64)$$

$$(\Delta \hat{P}_2)^2 = m_{0,2}e^{\delta t} \left[\omega_1 \left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_1^2} \right) \sin^2 \frac{\theta}{2} + \omega_2 \left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_2^2} \right) \cos^2 \frac{\theta}{2} \right] \frac{\hbar}{2}. \quad (3.65)$$

À partir des équations ci-dessus, nous obtenons maintenant les produits d'incertitudes comme

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{X}_1)^2 (\Delta \hat{P}_1)^2 &= \left[\left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_1^2}\right) \cos^4 \frac{\theta}{2} + \left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_2^2}\right) \sin^4 \frac{\theta}{2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} + \frac{\omega_2}{\omega_1} + \frac{\delta^2}{2\omega_1\omega_2}\right) \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \right] \frac{\hbar^2}{4}, \end{aligned} \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} (\Delta \hat{X}_2)^2 (\Delta \hat{P}_2)^2 &= \left[\left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_1^2}\right) \sin^4 \frac{\theta}{2} + \left(1 + \frac{\delta^2}{4\omega_2^2}\right) \cos^4 \frac{\theta}{2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} + \frac{\omega_2}{\omega_1} + \frac{\delta^2}{2\omega_1\omega_2}\right) \sin^2 \frac{\theta}{2} \cos^2 \frac{\theta}{2} \right] \frac{\hbar^2}{4}. \end{aligned} \quad (3.67)$$

Il est important de noter que les produits d'incertitude ci-dessus sont toujours supérieurs à $(\hbar/2)$, qui est le produit d'incertitude minimal autorisé en mécanique quantique.

Chapitre 4

Etude quantique de trois oscillateurs couplés dépendants du temps

4.1 Introduction

L'étude du comportement dynamique des systèmes oscillants, est donc un enjeu central en sciences appliquées et en mathématiques. Le modèle d'oscillateur harmonique a été bien étudié jusqu'à présent dans un large éventail de systèmes mécaniques ; cependant, si l'oscillateur interagit avec l'environnement ou avec d'autres oscillateurs, les systèmes associés ne peuvent pas être isolés dans de nombreux cas pratiques habituels.

Les oscillateurs couplés sont connectés de manière à ce que l'énergie puisse être transférée entre eux. Leur mouvement est généralement complexe et non périodique. Cependant, lorsque les oscillateurs présentent des mouvements complexes, on peut trouver un repère de coordonnées dans lequel chaque oscillateur oscille avec une fréquence très bien définie.

Les systèmes d'oscillateurs couplés sont très complexes du point de vue dynamique, en particulier lorsque leurs paramètres dépendent du temps et/ou lorsque le nombre de sous-systèmes oscillatoires couplés est supérieur à deux.

Malgré le rôle clé des modèles oscillatoires couplés dans les descriptions mécaniques

générales, leurs études ont été principalement réalisées pour les cas où les paramètres des oscillateurs, tels que les masses et les fréquences, sont indépendants du temps [71, 72, 73, 74, 75]. Conformément à la nécessité impérative de développer la dynamique des systèmes physiques oscillatoires non conservatifs, tant du côté pédagogique que de la recherche, nous considérons le système de trois oscillateurs couplés dans le cas où les paramètres de l'hamiltonien sont des fonctions arbitraires dépendantes du temps.

Dans ce chapitre, nous concentrons notre étude sur les caractéristiques quantiques de trois oscillateurs couplés dépendant du temps avec leurs solutions exactes de l'équation de Schrödinger. Nous utiliserons la méthode de la transformation unitaire comme approche alternative, ainsi que la technique de la matrice de rotation paramétrée par les angles d'Euler pour diagonaliser des matrices apparentées. C'est-à-dire que nous appliquerons des opérations unitaires successives à l'hamiltonien afin de le transformer en un hamiltonien simple. Par conséquent, les solutions des systèmes hamiltoniens dépendant du temps seront développées en utilisant des systèmes stationnaires simples équivalents.

4.2 Le modèle hamiltonien

Pour aborder une étude quantique de trois oscillateurs harmoniques couplés, nous devons d'abord décrire la dynamique fondamentale du système. Pour cela, nous considérons un hamiltonien dépendant du temps général qui décrit le système de trois oscillateurs harmoniques couplés suivant [17, 90]

$$\begin{aligned}
 H(t) = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{P_i^2}{m_i(t)} + C_i(t) X_i^2 \right] \\
 & + \frac{1}{2} [C_{12}(t)X_1X_2 + C_{13}(t)X_1X_3 + C_{23}(t)X_2X_3], \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

où $m_i(t), C_i(t) (i = 1, 2, 3)$, $C_{12}(t), C_{13}(t)$ et $C_{23}(t)$ sont des paramètres dépendant du temps qui peuvent être différentiables par rapport au temps; la convention pour i (y compris j et k) désignée ici sera appliquée tout au long du travail.

Les coordonnées généralisées classiques X_i et les moments conjugués P_i obéissent aux relations de commutation

$$[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [X_i, X_j] = [P_i, P_j] = 0. \quad (4.2)$$

Avant de procéder à l'étude quantique du système, il peut être instructif de donner les formes des équations classiques du mouvement du système. Selon la dynamique classique, les équations différentielles du premier ordre pour l'hamiltonien s'écrit

$$\dot{X}_i = \partial H / \partial P_i, \quad \dot{P}_i = -\partial H / \partial X_i. \quad (4.3)$$

Notons que ces équations de Hamilton sont souvent des alternatives utiles aux équations de Lagrange, car elles permettent de décrire la description classique du système sous la forme d'équations différentielles du premier ordre. En combinant les deux équations ci-dessus, nous obtenons facilement les équations classiques du mouvement comme suit

$$\ddot{X}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)}\dot{X}_1 + \frac{C_1(t)}{m_1(t)}X_1 + \frac{C_{12}(t)}{2m_1(t)}X_2 + \frac{C_{13}(t)}{2m_1(t)}X_3 = 0, \quad (4.4)$$

$$\ddot{X}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)}\dot{X}_2 + \frac{C_2(t)}{m_2(t)}X_2 + \frac{C_{12}(t)}{2m_2(t)}X_1 + \frac{C_{23}(t)}{2m_2(t)}X_3 = 0, \quad (4.5)$$

$$\ddot{X}_3 + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)}\dot{X}_3 + \frac{C_3(t)}{m_3(t)}X_3 + \frac{C_{13}(t)}{2m_3(t)}X_1 + \frac{C_{23}(t)}{2m_3(t)}X_2 = 0. \quad (4.6)$$

Remarquons que la recherche des solutions complètes du système d'équations (4.4)-(4.6) n'est peut-être pas une tâche facile car les paramètres associés sont dépendants explicitement du temps de manière arbitraire.

Pour analyser le comportement quantique du système, il est nécessaire de résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps associée à l'hamiltonien donné dans l'équation (4.1), qui est de la forme

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H(t)|\Psi(t)\rangle. \quad (4.7)$$

Pour les systèmes stationnaires décrits par un hamiltonien indépendant du temps, les solutions de l'équation (4.7) peut être facilement trouvé grâce à la méthode de séparation des variables. Au contraire, la méthode de séparation des variables ne peut pas être appliquée aux systèmes hamiltoniens généraux dépendant du temps, car la variable de temps ne peut pas être séparée aux variables canoniques. Pour cette raison, on fait appel à l'approche de la transformation unitaire dans le paragraphe suivant.

4.3 Transformations unitaires

Nous considérons une transformation unitaire dépendante du temps comme un outil théorique pour notre analyse du système. Cela peut nous permettre de réduire l'équation de Schrödinger compliquée d'origine (4.7) à un équivalent, mais une équation très simplifiée impliquant un hamiltonien plus simple.

Afin de réduire l'hamiltonien de notre problème en une forme simple soluble, nous introduisons un opérateur unitaire comme

$$U(t) = U_1(t)U_2(t), \quad (4.8)$$

où les deux opérateurs $U_1(t)$, et $U_2(t)$ sont donnés par

$$U_1(t) = \prod_{i=1}^3 \exp\left(\frac{i}{2\hbar}(P_i X_i + X_i P_i) \ln \sqrt{m_i(t)}\right), \quad (4.9)$$

$$U_2(t) = \exp\left(-\frac{i}{4\hbar} \sum_{i=1}^3 \frac{\dot{m}_i(t)}{m_i(t)} X_i^2\right). \quad (4.10)$$

Nous effectuons une transformation unitaire pour la fonction d'onde $\Psi(t)$ donné dans l'équation (4.7) comme

$$\Psi(t) = U(t)\psi(t), \quad (4.11)$$

où $\psi(t)$ est la nouvelle fonction d'onde. Ensuite, l'équation de Schrödinger (4.7), du

système d'origine est transformée sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = H_1(t) \psi(t), \quad (4.12)$$

où le nouveau hamiltonien $H_1(t)$ est s'écrit comme suit

$$H_1(t) = U^{-1}(t)H(t)U(t) - i\hbar U^{-1}(t) \frac{\partial}{\partial t} U(t). \quad (4.13)$$

À partir d'une petite évaluation, utilisant la formule Baker-Campbell-Hausdorff [76]

$$U^{-1}(t) \frac{\partial}{\partial t} U(t) = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2!} \left[\frac{\partial S}{\partial t}, S \right] + \frac{1}{3!} \left[\left[\frac{\partial S}{\partial t}, S \right], S \right] + \frac{1}{4!} \left[\left[\left[\frac{\partial S}{\partial t}, S \right], S \right], S \right] + \dots, \quad (4.14)$$

avec $U(t) = \exp[S(t)]$, on a

$$H_1(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 [P_i^2 + \varpi_i^2(t) X_i^2] + \frac{1}{2} K_{12}(t) X_1 X_2 + \frac{1}{2} K_{13}(t) X_1 X_3 + \frac{1}{2} K_{23}(t) X_2 X_3, \quad (4.15)$$

où

$$\varpi_i^2(t) = \left[\frac{C_i(t)}{m_i(t)} + \frac{1}{4} \left(\frac{\dot{m}_i^2(t)}{m_i^2(t)} - 2 \frac{\ddot{m}_i(t)}{m_i(t)} \right) \right], \quad (4.16)$$

$$K_{12}(t) = \frac{C_{12}(t)}{\sqrt{m_1(t) m_2(t)}}, \quad K_{13}(t) = \frac{C_{13}(t)}{\sqrt{m_1(t) m_3(t)}}, \quad K_{23}(t) = \frac{C_{23}(t)}{\sqrt{m_2(t) m_3(t)}}. \quad (4.17)$$

Puisque $H_1(t)$ contient aussi des termes en interaction, une simple investigation des caractéristiques de base du système n'est pas une tâche facile. Afin de surmonter une

telle difficulté, nous écrivons l'hamiltonien $H_1(t)$ sous forme matricielle, tel que

$$H_1(t) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 P_i \delta_{ij} P_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 X_i \Gamma_{ij}(t) X_j, \quad (4.18)$$

où $\delta_{ij} = 1$ for $i = j$, tandis que $\delta_{ij} = 0$ pour $i \neq j$, et les deux matrices prennent les formes

$$\Gamma(t) = \begin{pmatrix} \varpi_1^2(t) & \frac{1}{2}K_{12}(t) & \frac{1}{2}K_{13}(t) \\ \frac{1}{2}K_{12}(t) & \varpi_2^2(t) & \frac{1}{2}K_{23}(t) \\ \frac{1}{2}K_{13}(t) & \frac{1}{2}K_{23}(t) & \varpi_3^2(t) \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

Malgré la transformation de l'hamiltonien réalisée jusqu'à présent, le nouveau hamiltonien (4.18) a toujours des termes couplés $X_i X_j$. Pour cette raison, nous procéderons à une autre transformation dans la section suivante afin de découpler les oscillateurs harmoniques en éliminant ces termes.

4.4 Matrice de rotation et diagonalisation de l'hamiltonien

Nous allons maintenant diagonaliser la matrice hamiltonienne $H_1(t)$ en effectuant une autre transformation unitaire correspondant à une rotation tridimensionnelle. Nous introduirons un opérateur unitaire $\Lambda(t)$ paramétré par trois angles d'Euler (ϕ, θ, φ) afin d'effectuer des rotations tridimensionnelles. Bien sûr, le choix de telles rotations¹ n'est pas unique. Il existe plusieurs choix pour prendre une matrice de rotation qui peut être obtenu concernant l'orientation des axes.

Afin de réaliser la transformation unitaire mentionnée ci-dessus, nous choisissons la matrice de rotation comme

¹Les rotations sont des transformations orthogonales qui préservent la longueur ou la norme d'un vecteur d'état.

$$\mathbb{R} = \mathbb{R}_{X_1}(\phi)\mathbb{R}_{X_2}(\theta)\mathbb{R}_{X_3}(\varphi), \quad (4.20)$$

où

$$\mathbb{R}_{X_1}(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad (4.21)$$

$$\mathbb{R}_{X_2}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (4.22)$$

$$\mathbb{R}_{X_3}(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.23)$$

Cette matrice peut également être écrite sous une forme plus compacte, telle que

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} \cos \theta \cos \phi & \sin \phi & \cos \phi \sin \theta \\ -\sin \theta \sin \varphi - \cos \theta \cos \varphi \sin \phi & \cos \phi \cos \varphi & \cos \theta \sin \varphi - \sin \theta \cos \varphi \sin \phi \\ -\sin \theta \cos \varphi + \cos \theta \sin \phi \sin \varphi & -\cos \phi \sin \varphi & \cos \theta \cos \varphi + \sin \theta \sin \varphi \sin \phi \end{pmatrix}. \quad (4.24)$$

Il est clair que la forme de \mathbb{R} est une matrice orthogonale 3×3 avec un déterminant égale l'unité.

D'autre part, dans la mécanique quantique, le groupe de rotations est représenté sur l'espace Hilbert \mathcal{H} par des opérateurs unitaires. Nous désignons l'opérateur unitaire correspondant à $\mathbb{R}_{X_1}(\phi)$ comme $\Lambda(\phi)$ où le paramètre ϕ est l'angle de rotation autour de l'axe X_1 .

L'opérateur unitaire $\Lambda(\phi)$ agit sur l'opérateur de position X et le moment conjugué

P comme

$$\Lambda^{-1}(\phi)X\Lambda(\phi) = \mathbb{R}(\phi)X, \quad \Lambda^{-1}(\phi)P\Lambda(\phi) = \mathbb{R}(\phi)P. \quad (4.25)$$

Pour une transformation infinitésimale, nous pouvons écrire

$$\Lambda(\delta\phi) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta\phi.\mathbf{J} + O(\delta\phi^2), \quad (4.26)$$

pour certains générateurs hermitiens \mathbf{J}/\hbar . Puisque les angles sont sans dimension, la dimension de \mathbf{J} doit être la même que celle de la longueur \times quantité de mouvement. Plus tard, nous verrons que \mathbf{J} correspond à l'opérateur de moment cinétique. Nous pouvons utiliser \mathbf{J}/\hbar comme générateur de rotation par sa définition.

Notons que les composants des générateurs de rotation obéissent aux relations de la commutation

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k, \quad [J_i, X_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}X_k, \quad [J_i, P_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}P_k, \quad [J_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}A_k, \quad (4.27)$$

où ϵ_{ijk} est le symbole Levi-civita et A_j sont trois composants d'un opérateur linéaire A (A pourrait être un opérateur de vecteur ou pseudo vecteur). Par rapport aux relations $[P_i, P_j] = 0$, la non-trivialité des relations de commutation (4.27) survient purement parce que $\mathbf{SO}(3)$ est un groupe non auto-abélien, contrairement au groupe de translations.

Selon les relations de commutation (4.27), il est possible d'écrire l'équation (4.26) sous la forme

$$\Lambda(\phi) = e^{i\phi.\mathbf{J}/\hbar}. \quad (4.28)$$

Cela peut être utilisé pour effectuer une rotation finie d'une matrice autour d'un axe fixe ϕ . par conséquent, il est donc possible d'écrire l'opérateur unitaire qui correspond à la matrice de rotation $\mathbb{R} = \mathbb{R}_{X_1}(\phi)\mathbb{R}_{X_2}(\theta)\mathbb{R}_{X_3}(\varphi)$ sous la forme

$$\Lambda(t) = e^{i\phi(t)J_1}e^{i\theta(t)J_2}e^{i\varphi(t)J_3}. \quad (4.29)$$

Utilisons l'équation (4.14), nous obtenons la relation associée à la paramétrisation de l'angle d'Euler en termes de moment angulaire sous la forme

$$i\hbar\Lambda^{-1}(t)\frac{\partial}{\partial t}\Lambda(t) = \sum_{i=1}^3 b_i(t)J_i, \quad (4.30)$$

où $b_i(t)$ sont donnés par

$$b_1(t) = -\dot{\phi} \cos \theta \cos \varphi + \dot{\theta} \sin \varphi, \quad (4.31)$$

$$b_2(t) = -\dot{\phi} \cos \theta \sin \varphi - \dot{\theta} \cos \varphi, \quad (4.32)$$

$$b_3(t) = -\dot{\varphi} - \dot{\phi} \sin \theta. \quad (4.33)$$

Notons que les équations (4.31), (4.32) et (4.33), sont légèrement différentes par rapport aux représentations données dans la Réf.[77]. Cette différence provient de notre choix² de $\mathbb{R}_{X_1}(\phi)\mathbb{R}_{X_2}(\theta)\mathbb{R}_{X_3}(\varphi)$ donné dans l'équation (4.20).

En se basant sur les équations (4.29) et (4.30), on peut vérifier que \mathbb{R} satisfait la relation

$$\left(\mathbb{R}^{-1}\frac{\partial\mathbb{R}}{\partial t}\right)_{ij} = i\hbar\epsilon_{ijk}b_k, \quad (4.34)$$

où \mathbb{R}^{-1} désigne la matrice transposée (c'est-à-dire l'inverse) de \mathbb{R} .

Selon l'équation (4.25), le vecteur de colonne de coordonnées de rotation $X\mathbb{R}$ et le vecteur de colonne de coordonnées de moment de rotation $P\mathbb{R}$ sont donnés respectivement par les expressions : $\Lambda e^{-1}(t)X\Lambda(t) = \mathbb{R}X$, et $\Lambda^{-1}(t)P\Lambda(t) = \mathbb{R}P$,

Nous allons maintenant voir comment utiliser une représentation matricielle pour diagonaliser l'hamiltonien $H_1(t)$ en utilisant l'opérateur de rotation. Pour commencer, écrivons la matrice Γ en termes de nouvelle matrice diagonale comme

$$\Gamma = \mathbb{R}(t) \text{diag} [\Omega_1^2(t), \Omega_2^2(t), \Omega_3^2(t)] \mathbb{R}^{-1}(t), \quad (4.35)$$

²Mais dans tous les cas, le choix des axes de rotation n'a aucune influence sur le résultat final.

$$\Gamma = \Lambda(t) \text{diag} [\Omega_1^2(t), \Omega_2^2(t), \Omega_3^2(t)] \Lambda^{-1}(t), \quad (4.36)$$

$$\mathbb{R}^{-1} \Gamma_{ij} \mathbb{R} = D, \quad (4.37)$$

où

$$D = \text{diag} [\Omega_1^2(t), \Omega_2^2(t), \Omega_3^2(t)]. \quad (4.38)$$

En raison de la relation étroite entre les opérateurs de rotation et ceux du moment cinétique orbital, il est clair que l'invariance³ de l'hamiltonien par rotation implique que l'hamiltonien commute avec les opérateurs J^2 et J_3 (et, en fait, aussi avec J_1 et J_2). En tenant compte que le carré de l'ancienne impulsion conjuguée, P_i^2 dans l'hamiltonien $H_1(t)$ reste inchangé par la transformation que nous avons prise ici. Cependant, les nouvelles expressions des coordonnées sont représentées comme étant

$$\begin{aligned} q_1 &= X_1 \cos \theta \cos \phi + X_2 (-\sin \theta \sin \varphi - \cos \theta \cos \varphi \sin \phi) \\ &\quad + X_3 (-\sin \theta \cos \varphi + \cos \theta \sin \phi \sin \varphi), \end{aligned} \quad (4.39)$$

$$q_2 = X_1 \sin \phi + X_2 \cos \phi \cos \varphi - X_3 \cos \phi \sin \varphi, \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} q_3 &= X_1 \cos \phi \sin \theta + X_2 (\cos \theta \sin \varphi - \sin \theta \cos \varphi \sin \phi) \\ &\quad + X_3 (\cos \theta \cos \varphi + \sin \theta \sin \varphi \sin \phi). \end{aligned} \quad (4.41)$$

En revanche, les nouvelles fréquences $\Omega_1^2(t)$, $\Omega_2^2(t)$, et $\Omega_3^2(t)$, qui représentent les valeurs

³Il est important de souligner que l'invariance par rotation des hamiltoniens est responsable de la conservation du moment cinétique en mécanique classique. De même, si l'observable représentant la rotation en mécanique quantique commute avec l'hamiltonien du système, la quantité physique est conservée par rotation.

propres de la matrice D sont données par [78, 79]

$$\Omega_1^2(t) = \frac{\Omega}{3\sqrt{2}} \cos \Phi + \frac{1}{3} (\varpi_1^2 + \varpi_2^2 + \varpi_3^2), \quad (4.42)$$

$$\Omega_2^2(t) = \frac{\Omega}{3\sqrt{2}} \cos \left(\Phi + \frac{2\pi}{3} \right) + \frac{1}{3} (\varpi_1^2 + \varpi_2^2 + \varpi_3^2), \quad (4.43)$$

$$\Omega_3^2(t) = \frac{\Omega}{3\sqrt{2}} \cos \left(\Phi - \frac{2\pi}{3} \right) + \frac{1}{3} (\varpi_1^2 + \varpi_2^2 + \varpi_3^2), \quad (4.44)$$

où

$$\Omega = 2[(\varpi_1^2 - \varpi_2^2)^2 + (\varpi_1^2 - \varpi_3^2)^2 + (\varpi_2^2 - \varpi_3^2)^2 + \frac{3}{2} (K_{12}^2 + K_{13}^2 + K_{23}^2)]^{\frac{1}{2}}, \quad (4.45)$$

$$\Phi(t) = \frac{1}{3} \arccos \left(\frac{A(t)}{2[B(t)]^{3/2}} \right), \quad (4.46)$$

avec

$$\begin{aligned} A(t) = & -3 (\varpi_1^2 + \varpi_2^2) (\varpi_1^2 + \varpi_3^2) (\varpi_2^2 + \varpi_3^2) \\ & -27 \left(\frac{1}{4} \varpi_1^2 K_{23}^2 + \frac{1}{4} \varpi_2^2 K_{13}^2 + \frac{1}{4} \varpi_3^2 K_{12}^2 \right) \\ & +2 (\varpi_1^6 + \varpi_2^6 + \varpi_3^6) + 18 \left(\varpi_1^2 \varpi_2^2 \varpi_3^2 + \frac{3}{8} K_{12} K_{13} K_{23} \right) \\ & +9 (\varpi_1^2 + \varpi_2^2 + \varpi_3^2) \left(\frac{1}{4} K_{12}^2 + \frac{1}{4} K_{13}^2 + \frac{1}{4} K_{23}^2 \right), \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} B(t) = & \frac{1}{2} \left[(\varpi_1^2 - \varpi_2^2)^2 + (\varpi_1^2 - \varpi_3^2)^2 + (\varpi_2^2 - \varpi_3^2)^2 \right] \\ & +3 \left(\frac{1}{4} K_{12}^2 + \frac{1}{4} K_{13}^2 + \frac{1}{4} K_{23}^2 \right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Il est important de noter que, la dérivation des relations qui représente les angles d'Euler correspond aux valeurs propres $\Omega_i^2(t)$ sont calculées à partir de la relation $\mathbb{R}^{-1} \Gamma_{ij} \mathbb{R} = D$, à condition que les éléments non diagonaux de la matrice D sont égaux à zéro avec la condition : $\sum_{i=1}^3 \varpi_i^2(t) = \sum_{i=1}^3 \Omega_i^2(t)$, et l'inégalité de Sylvester entre les paramètres de couplage et les fréquences doit satisfaire [71] : $\max(\varpi_1^2, 0) \times \max(\varpi_2^2 \varpi_3^2 - K_{23}^2, 0) \times$

$\max(\Omega_1^2 \Omega_2^2 \Omega_3^2, 0) > 0$. Ensuite, les angles propres d'Euler peuvent être exprimés comme

$$\varphi(t) = \arctan \left\{ \frac{[\Omega_2^4(t) - [\varpi_1^2(t) + \varpi_2^2(t)] \Omega_2^2(t) + \varpi_1^2(t) \varpi_2^2(t) - K_{12}^2(t)] [\Omega_1^2(t) - \Omega_3^2(t)]}{[\Omega_1^4(t) - [\varpi_1^2(t) + \varpi_2^2(t)] \Omega_1^2(t) + \varpi_1^2(t) \varpi_2^2(t) - K_{12}^2(t)] [\Omega_3^2(t) - \Omega_2^2(t)]} \right\}^{1/2}, \quad (4.48a)$$

$$\theta(t) = \arccos \left\{ \frac{\Omega_3^4(t) - (\varpi_1^2(t) + \varpi_2^2(t)) \Omega_3^2(t) + \varpi_1^2(t) \varpi_2^2(t) - K_{12}^2(t)}{[\Omega_3^2(t) - \Omega_1^2(t)] [\Omega_3^2(t) - \Omega_2^2(t)]} \right\}^{1/2}, \quad (4.48b)$$

$$\phi(t) = \arctan \left\{ \frac{\Omega_3^4(t) - [\varpi_1^2(t) + \varpi_3^2(t)] \Omega_3^2(t) + \varpi_1^2(t) \varpi_3^2(t) - K_{13}^2(t)}{\Omega_3^4(t) - [\varpi_2^2(t) + \varpi_3^2(t)] \Omega_3^2(t) + \varpi_2^2(t) \varpi_3^2(t) - K_{23}^2(t)} \right\}^{1/2}. \quad (4.48c)$$

Sur la base de cette analyse algébrique, on voit finalement que $H_2(t)$ prend la forme

$$\begin{aligned} H_2(t) &= \Lambda^{-1}(t) H_1(t) \Lambda(t) - i\hbar \Lambda^{-1}(t) \frac{\partial}{\partial t} \Lambda(t) \\ &= \sum_{i=1}^3 \left[\frac{1}{2} \left(\hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} \Omega_i^2(t) \hat{q}_i^2 \right) + b_i(t) \hat{J}_i \right]. \end{aligned} \quad (4.49)$$

Cet hamiltonien est très simple par rapport à l'hamiltonien original. Cependant, nous devons encore éliminer un terme indésirable, c'est-à-dire le dernier terme $b_i(t) \hat{J}_i$ dans l'équation ci-dessus. Soudainement, nous sommes arrivés à une situation très compliquée, dans laquelle le nouveau hamiltonien contient un terme additif. Bien qu'il semble qu'une telle élimination soit difficile à première vue, il est possible de la supprimer du dernier terme de l'équation (4.49) en appliquant la méthode du modèle de l'extinction soudaine, qui est désignée dans la Réf.[80]. Sur la base d'un tel modèle, cette approche est nécessaire pour que l'hamiltonien puisse être simplifié sans influencer le comportement du système physique considéré.

Dans notre cas, une telle élimination pour que cette approche peut être appliquer, est de supposer que les angles d'Euler (θ, ϕ, φ) sont des constantes indépendantes du temps⁴, c'est-à-dire $\dot{\varphi} = \dot{\theta} = \dot{\phi} = 0$. Par conséquent, les vitesses d'Euler $b_i(t) = 0$, ce qui fait que le dernier terme de l'équation (4.49) est ignoré.

⁴Apparemment, puisque (θ, ϕ, φ) sont des paramètres libres indépendants, il est toujours possible de les choisir indépendants du temps.

4.5 Solutions quantiques

Comme le montre la section précédente, l'hamiltonien d'origine peut être transformé en

$$H_2(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 [p_i^2 + \Omega_i^2(t)q_i^2]. \quad (4.50)$$

Ceci est équivalent aux trois hamiltoniens individuels correspondant aux oscillateurs harmoniques simples ayant les fréquences dépendant du temps $\Omega_i(t)$ et ayant des masses égales à l'unité. Puisque les trois oscillateurs sont maintenant découplés, il est possible de trouver la solution de l'équation de Schrödinger associée à ce nouvel hamiltonien. D'ailleurs, les représentations sous forme fermée de solutions quantiques analytiques et classiques pour un tel système hamiltonien ne sont possibles que lorsque les fréquences dépendant du temps $\Omega_i(t)$ sont des fonctions intégrables de t . Afin d'obtenir les solutions quantiques de manière formelle et générale, nous recourons maintenant à la théorie des invariants.

En utilisant l'équation de Liouville-von Neumann pour l'invariant hermitien $I(t)$, qui est de la forme

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[I, H_2] = 0, \quad (4.51)$$

nous pouvons dériver la forme exacte de l'invariant. Une évaluation simple après l'insertion de l'équation (4.50) dans l'équation (4.51) mène à [5, 6, 7]

$$I(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\left(\frac{q_i}{\rho_i} \right)^2 + (\rho_i \dot{q}_i - \dot{\rho}_i q_i)^2 \right], \quad (4.52)$$

où les fonctions $\rho_i(t)$ satisfont l'équation de Milne-Pinney généralisée [41, 42, 83, 84, 85]

$$\ddot{\rho}_i + \Omega_i^2 \rho_i = 1/\rho_i^3. \quad (4.53)$$

A condition que les formes intégrables exactes de $\rho_i(t)$ soient connues, il est possible de trouver les solutions quantiques complètes des systèmes dynamiques transformés en

résolvant l'équation aux valeurs propres de $I(t)$.

Si nous désignons les fonctions propres de $I(t)$ comme $\psi_I(q_1, q_2, q_3, t)$, l'équation aux valeurs propres de $I(t)$ est donnée par

$$I(t)\psi_I(q_1, q_2, q_3, t) = \lambda_{n_1, n_2, n_3}\psi_I(q_1, q_2, q_3, t), \quad (4.54)$$

où λ_{n_1, n_2, n_3} sont les valeurs propres discrètes indépendantes du temps. Selon la forme de $I(t)$ donnée dans l'équation (4.54), l'équation ci-dessus est une équation différentielle du second ordre. L'évaluation simple de l'équation (4.52) donne les valeurs propres de la forme

$$\lambda_{n_1, n_2, n_3} = \hbar \sum_{i=1}^3 \left(n_i + \frac{1}{2} \right), \quad (4.55)$$

ainsi que les fonctions propres qui sont représentées par

$$\begin{aligned} \psi_I(q_1, q_2, q_3, t) &= \psi_I(q_1, t) \otimes \psi_I(q_2, t) \otimes \psi_I(q_3, t) \\ &= \prod_{i=1}^3 \left\{ \left(\frac{1}{(\pi\hbar)^{1/2} n_i! 2^{n_i} \rho_i} \right)^{1/2} H_{n_i} \left(\frac{q_i}{\hbar^{1/2} \rho_i} \right) \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_i}{\rho_i} + \frac{i}{\rho_i^2} \right) q_i^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

où H_{n_i} sont des polynômes Hermite.

La solution (4.56) est un produit des trois solutions quantiques indépendantes des oscillateurs découplés et la solution de chaque oscillateur présente un ensemble orthonormé complet.

Considérons maintenant l'équation de Schrödinger associée à l'hamiltonien transformé $H_2(t)$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_S(q_1, q_2, q_3, t) = H_2(t) \psi_S(q_1, q_2, q_3, t). \quad (4.57)$$

D'après la théorie de Lewis et Riesenfeld, les solutions $\psi_S(q_1, q_2, q_3, t)$ de cette équation

sont liées aux fonctions propres $\psi_I(q_1, q_2, q_3, t)$ de l'invariant $I(t)$ par

$$\psi_S(q_1, q_2, q_3, t) = e^{i\alpha_{n_1, n_2, n_3}(t)} \psi_I(q_1, q_2, q_3, t), \quad (4.58)$$

où $\alpha_{n_1, n_2, n_3}(t)$ sont les phases quantiques totales. À partir d'une évaluation directe après l'insertion de l'équation (4.58) dans l'équation (4.57), on voit que $\alpha_{n_1, n_2, n_3}(t)$ satisfait l'équation

$$\frac{\partial}{\partial t} \alpha_{n_1, n_2, n_3}(t) = \frac{1}{\hbar} \langle \psi_I(q_1, q_2, q_3, t) | \left(\frac{\partial}{\partial t} - H_2(t) \right) | \psi_I(q_1, q_2, q_3, t) \rangle. \quad (4.59)$$

En résolvant cette équation en utilisant l'équation (4.57), on a

$$\alpha_{n_1, n_2, n_3}(t) = - \sum_{i=1}^3 \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{dt'}{\rho_i^2(t')}. \quad (4.60)$$

Et par conséquent, les solutions $\psi_s(q_1, q_2, q_3, t)$ de l'équation de Schrödinger (4.57), qui régit l'évolution de l'hamiltonien transformé sont exprimés comme

$$\begin{aligned} \psi_S(q_1, q_2, q_3, t) &= \prod_{i=1}^3 \left\{ \left(\frac{1}{(\pi \hbar)^{1/2} n_i! 2^{n_i} \rho_i} \right)^{1/2} H_{n_i} \left(\frac{q_i}{\hbar^{1/2} \rho_i} \right) \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_i}{\rho_i} + \frac{i}{\rho_i^2} \right) q_i^2 \right] \right\} \\ &\times \exp[i\alpha_{n_1, n_2, n_3}(t)], \end{aligned} \quad (4.61)$$

où les phases $\alpha_{n_1, n_2, n_3}(t)$ sont données dans l'équation (4.60). Maintenant, en termes de variables du système original, les fonctions d'onde $\psi_S(q_1, q_2, q_3, t)$ sont écrites sous la forme

$$\psi_S(q_1, q_2, q_3, t) \longrightarrow \Lambda(t) \psi_S(X_1, X_2, X_3, t) = \psi_S(RX_1, RX_2, RX_3, t). \quad (4.62)$$

La relation entre les fonctions d'onde, $\psi_S(q_1, q_2, q_3, t)$ dans le système original décrit par l'hamiltonien donné dans l'équation (4.1) et les fonctions d'onde $\psi_S(q_1, q_2, q_3, t)$

dans le système transformé sont représentées comme

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(X_1, X_2, X_3, t) = U_1(t)U_2(t)\Lambda(t)\psi_S(X_1, X_2, X_3, t). \quad (4.63)$$

Par conséquent, en utilisant les équations (4.59) et (4.62), les solutions quantiques exactes de l'équation de Schrödinger pour les trois oscillateurs couplés dépendant du temps données par la fonction d'onde

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1, n_2, n_3}(X_1, X_2, X_3, t) &= \prod_{i=1}^3 \left\{ \left(\frac{\sqrt{m_i(t)}}{(\pi\hbar)^{1/2} n_i! 2^{n_i} \rho_i} \right)^{1/2} H_{n_i}(\xi_i) \right. \\ &\quad \times \exp \left[\left(f_i(t) - \frac{i\dot{m}_i(t)}{4\hbar} \right) X_i^2 \right] \left. \right\}, \\ &\quad \times \exp [f_{12}(t)X_1X_2 + f_{13}(t)X_1X_3 + f_{23}(t)X_2X_3] \\ &\quad \times \exp \left[-i \sum_{i=1}^3 \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{dt'}{\rho_i^2(t')} \right], \end{aligned} \quad (4.64)$$

où les fonctions ξ_i sont exprimées en termes de variables de position X_i , tel que

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \frac{1}{\hbar^{1/2}\rho_1} \left[\cos\theta \cos\phi \sqrt{m_1(t)}X_1 - (\sin\theta \sin\phi + \cos\theta \cos\phi \sin\phi) \sqrt{m_2(t)}X_2 \right. \\ &\quad \left. - (\sin\theta \cos\phi - \cos\theta \sin\phi \sin\phi) \sqrt{m_3(t)}X_3 \right], \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\xi_2 = \frac{1}{\hbar^{1/2}\rho_2} \left[\sin\phi \sqrt{m_1(t)}X_1 + \cos\phi \cos\phi \sqrt{m_2(t)}X_2 - \cos\phi \sin\phi \sqrt{m_3(t)}X_3 \right] \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} \xi_3 &= \frac{1}{\hbar^{1/2}\rho_3} \left[\cos\phi \sin\theta \sqrt{m_1(t)}X_1 + (\cos\theta \sin\phi - \sin\theta \cos\phi \sin\phi) \sqrt{m_2(t)}X_2 \right. \\ &\quad \left. + (\cos\theta \cos\phi + \sin\theta \sin\phi \sin\phi) \sqrt{m_3(t)}X_3 \right], \end{aligned} \quad (4.67)$$

et les coefficients dépendant du temps $f_i(t)$ sont donnés par

$$\begin{aligned}
f_1(t) &= \frac{im_1(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} + \frac{i}{\rho_1^2} \right) \cos^2 \theta \cos^2 \phi + \frac{im_1(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} + \frac{i}{\rho_2^2} \right) \sin^2 \phi \\
&+ \frac{im_1(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) \sin^2 \theta \cos^2 \phi \\
&+ \frac{im_3(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) \left(\cos^2 \theta \cos \varphi + \sin^2 \theta \sin^2 \phi \sin^2 \varphi + \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin \phi \sin 2\varphi \right),
\end{aligned} \tag{4.68}$$

$$\begin{aligned}
f_2(t) &= \frac{im_2(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} + \frac{i}{\rho_1^2} \right) \left(\cos^2 \theta \sin^2 \phi \cos^2 \varphi + \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin \phi \sin 2\varphi \right) \\
&+ \frac{im_2(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} + \frac{i}{\rho_2^2} \right) \cos^2 \phi \cos^2 \varphi \\
&+ \frac{im_2(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) \left(\sin^2 \theta \cos^2 \varphi \sin^2 \phi + \cos^2 \theta \sin^2 \varphi - \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin \phi \sin 2\varphi \right).
\end{aligned} \tag{4.69}$$

$$\begin{aligned}
f_3(t) &= \frac{im_3(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} + \frac{i}{\rho_1^2} \right) \left(\sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \cos^2 \theta \sin^2 \phi \sin^2 \varphi - \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin \phi \sin 2\varphi \right) \\
&+ \frac{im_3(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} + \frac{i}{\rho_2^2} \right) \cos^2 \phi \sin^2 \varphi \\
&+ \frac{im_3(t)}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) \left(\cos^2 \theta \cos \varphi + \sin^2 \theta \sin^2 \phi \sin^2 \varphi + \frac{1}{2} \sin 2\theta \sin \phi \sin 2\varphi \right),
\end{aligned} \tag{4.70}$$

tandis que $f_{12}(t)$, $f_{13}(t)$, et $f_{23}(t)$ sont de la forme

$$\begin{aligned}
f_{12}(t) &= \frac{-i\sqrt{m_1(t)m_2(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} + \frac{i}{\rho_1^2} \right) (\cos^2 \theta \sin 2\phi \cos \varphi + \cos \phi \sin 2\theta \sin \varphi) \\
&+ \frac{i\sqrt{m_1(t)m_2(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} + \frac{i}{\rho_2^2} \right) \sin 2\phi \cos \varphi \\
&- \frac{i\sqrt{m_1(t)m_2(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) (\sin^2 \theta \sin 2\phi \cos \varphi - \sin 2\theta \cos \phi \sin \varphi).
\end{aligned} \tag{4.71}$$

$$\begin{aligned}
f_{13}(t) = & \frac{i\sqrt{m_1(t)m_3(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} + \frac{i}{\rho_1^2} \right) (\cos^2 \theta \sin 2\phi \sin \varphi - \sin 2\theta \cos \phi \cos \varphi) \\
& - \frac{i\sqrt{m_1(t)m_3(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} + \frac{i}{\rho_2^2} \right) \sin 2\phi \sin \varphi \\
& + \frac{i\sqrt{m_1(t)m_3(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) (\sin^2 \theta \sin 2\phi \sin \varphi + \sin 2\theta \cos \phi \cos \varphi),
\end{aligned} \tag{4.72}$$

$$\begin{aligned}
f_{23}(t) = & \frac{i\sqrt{m_2(t)m_3(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_1}{\rho_1} + \frac{i}{\rho_1^2} \right) (\sin 2\theta \sin \phi \cos 2\varphi - \cos^2 \theta \sin^2 \phi \sin 2\varphi + \sin^2 \theta \sin 2\phi) \\
& - \frac{i\sqrt{m_2(t)m_3(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_2}{\rho_2} + \frac{i}{\rho_2^2} \right) \cos^2 \phi \sin 2\phi \\
& - \frac{i\sqrt{m_2(t)m_3(t)}}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}_3}{\rho_3} + \frac{i}{\rho_3^2} \right) (\sin 2\theta \sin \phi \cos 2\varphi + \sin^2 \theta \sin^2 \phi \sin 2\varphi \\
& - \cos^2 \theta \sin 2\varphi).
\end{aligned} \tag{4.73}$$

Bien que ces les solutions soient quelque peu compliquées, de telles solutions analytiques peuvent être fondamentalement utilisées pour analyser les propriétés quantiques du système. D'autre part, les solutions quantiques numériques obtenues, par exemple, à partir de la méthode FDTD (domaine des différences finies) [81] sont en général peu pratiques chaque fois que nous les utilisons comme des outils supplémentaires pour analyser le système donné, en particulier dans le cas où les paramètres des trois oscillateurs couplés varient dans le temps comme dans ce cas.

Il est convient de noter que le système de trois oscillateurs couplés dépendant du temps que nous avons considéré dans ce travail est assez général, où les paramètres $m_i(t)$, $C_i(t)$, et $C_{ij}(t)$ que nous avons utilisé sont de forme arbitraires variant en fonction du temps. Par conséquent, en prenant les dépendances temporelles des paramètres dans des formules spécifiques, nos résultats retrouvent ceux de certains autres systèmes précédemment traités. Par exemple, si on prend les masses $m_i(t)$ égales à l'unité, on peut

confirmer les résultats des Refs [71, 72].

Chapitre 5

Invariant dynamique de trois oscillateurs couplés dépendant du temps

5.1 Introduction

Dans ce chapitre 5, sur la base du chapitre 4, nous étudions la dynamique des trois oscillateurs couplés dépendant du temps, en utilisant la théorie de l'opérateur invariant. Nous dérivons un opérateur dynamique invariant pour trois oscillateurs couplés dépendant du temps et nous montrons qu'il peut être utilisé pour développer la théorie dynamique quantique du système. Cependant, en raison de la complexité des trois systèmes oscillatoires couplés que nous considérons, nous allons diagonaliser l'invariant à travers la technique de la transformation unitaire. L'utilisation de la méthode de transformation unitaire peut simplifier le problème de quantification du système et la diagonalisation de l'invariant peut grandement simplifier l'analyse de la dynamique du système. Afin de montrer cela, des fonctions d'onde quantiques exactes du système seront dérivées en utilisant les états propres de l'opérateur invariant.

5.2 Construction de l'invariant classique

On considère $H(t)$ un hamiltonien dépendant du temps généralisé qui décrit le système de trois oscillateurs harmoniques couplées avec des masses $m_i(t)$ ($i = 1, 2, 3$) et des fréquences $\omega_i(t)$ dépendantes du temps. L'hamiltonien est écrit sous la forme [17, 90]

$$H(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{P_i^2}{m_i(t)} + m_i(t) \omega_i^2 X_i^2 \right] + \frac{1}{2} [k_{12}(t)X_1X_2 + k_{13}(t)X_1X_3 + k_{23}(t)X_2X_3], \quad (5.1)$$

tels que les fonctions $k_{12}(t)$, $k_{13}(t)$ et $k_{23}(t)$ sont les sparamètres de couplage.

Nous choisissons un invariant sous une forme identique au celle de l'hamiltonien (5.1). Supposons que sa formule soit donnée sous la forme [17, 90]

$$O(t) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 [A_i(t)P_i^2 + B_i(t)X_i P_i + C_i(t)X_i^2] + \frac{1}{2} [D_{12}(t)X_1X_2 + D_{13}(t)X_1X_3 + D_{23}(t)X_2X_3], \quad (5.2)$$

où les paramètres dépendant du temps $A_i(t)$, $B_i(t)$, $C_i(t)$, $D_{12}(t)$, $D_{13}(t)$, et $D_{23}(t)$ sont des fonctions réelles et différentiables, qui seront explicitement évaluées ultérieurement.

L'invariant dynamique $O(t)$ en mécanique classique, satisfaire l'équation (3.9). Pour dériver les formules des paramètres dépendant du temps dans l'équation (5.2), nous effectuons une évaluation après avoir inséré les équations (5.1) et (5.2) dans l'équation (3.9). Ensuite, cela donne

$$\dot{A}_i(t) = \frac{-2B_i(t)}{m_i(t)}, \quad (5.3)$$

$$\dot{B}_i(t) = m_i(t)\omega_i^2(t)A_i(t) - \frac{C_i(t)}{m_i(t)}, \quad (5.4)$$

$$\dot{C}_i(t) = 2m_i(t)\omega_i^2(t)B_i(t), \quad (5.5)$$

$$\dot{D}_{12}(t) = k_{12}(t) [B_1(t) + B_2(t)], \quad (5.6)$$

$$\dot{D}_{13}(t) = k_{13}(t) [B_1(t) + B_3(t)], \quad (5.7)$$

$$\dot{D}_{23}(t) = k_{23}(t) [B_2(t) + B_3(t)]. \quad (5.8)$$

Et par suite, les solutions possibles de ces équations couplées sont obtenues sous les formes suivantes

$$A_i(t) = \frac{1}{m_i(t)}, \quad (5.9)$$

$$B_i(t) = \frac{\dot{m}_i(t)}{2m_i(t)}, \quad (5.10)$$

$$C_i(t) = \int_0^t \omega_i^2(t) \dot{m}_i(t) dt, \quad (5.11)$$

$$D_{12}(t) = \int_0^t k_{12}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \right) dt, \quad (5.12)$$

$$D_{13}(t) = \int_0^t k_{13}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{2m_3(t)} \right) dt, \quad (5.13)$$

$$D_{23}(t) = \int_0^t k_{23}(t) \left(\frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{2m_3(t)} \right) dt. \quad (5.14)$$

Et par conséquent, nous pouvons écrire l'invariant classique $O(t)$ sous la forme

$$\begin{aligned} O(t) = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{P_i^2}{m_i(t)} + \frac{\dot{m}_i(t)}{m_i(t)} (X_i P_i) + \left(\int_0^t \omega_i^2(t) \dot{m}_i(t) dt \right) X_i^2 \right] \\ & + \frac{1}{2} \left(\int_0^t k_{12}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} \right) dt \right) X_1 X_2 \\ & + \frac{1}{2} \left(\int_0^t k_{13}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)} \right) dt \right) X_1 X_3 \\ & + \frac{1}{2} \left(\int_0^t k_{23}(t) \left(\frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)} \right) dt \right) X_2 X_3. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Il est évident que cet invariant n'est pas unique; il peut exister de nombreux invariants pour l'hamiltonien donné, car les équations (5.9)-(5.14) ne sont pas déterminés de manière

unique.

5.3 Invariant quantique

Dans le cas où nous connaissons un invariant classique du système, nous pouvons facilement identifier l'invariant quantique¹ (homologue) en raison de la relation simple $[X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$. En remplaçant les variables canoniques dans l'invariant classique avec les opérateurs quantiques correspondants, nous obtenons l'opérateur invariant quantique tel que

$$\begin{aligned} \hat{O}(t) = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\frac{\hat{P}_i^2}{m_i(t)} + \frac{\dot{m}_i(t)}{2m_i(t)} (\hat{X}_i \hat{P}_i + \hat{X}_i \hat{P}_i) + \left(\int_0^t \omega_i^2(t) \dot{m}_i(t) dt \right) \hat{X}_i^2 \right] \\ & + \frac{1}{2} \left(\int_0^t k_{12}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} \right) dt \right) \hat{X}_1 \hat{X}_2 \\ & + \frac{1}{2} \left(\int_0^t k_{13}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{2m_1(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{2m_3(t)} \right) dt \right) \hat{X}_1 \hat{X}_3 \\ & + \frac{1}{2} \left(\int_0^t k_{23}(t) \left(\frac{\dot{m}_2(t)}{2m_2(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{2m_3(t)} \right) dt \right) \hat{X}_2 \hat{X}_3. \end{aligned} \quad (5.16)$$

On peut montrer que cet invariant obéit à l'équation de Liouville-von Neumann quand on a déjà vu en équation (2.22).

Parce que l'opérateur invariant quantique donné dans l'équation (5.16) est une forme un peu compliquée, il peut être nécessaire de la simplifier afin de l'utiliser dans l'analyse dynamique du système. Pour cela, nous utilisons la méthode de la transformation unitaire en introduisant des opérateurs unitaires appropriés.

Dans un premier temps, nous considérons l'opérateur unitaire suivant

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_1(t) \hat{U}_2(t), \quad (5.17)$$

¹La relation entre des équations couplées, (X_i, P_j) , et les variables quantiques correspondantes, (\hat{X}_i, \hat{P}_j) , est donné par les deux équations (3.2) et (4.2).

où $\hat{U}_1(t)$ et $\hat{U}_2(t)$ sont donnés par

$$\hat{U}_1(t) = \prod_{i=1}^3 \exp \left[\frac{i}{2\hbar} (\hat{P}_i \hat{X}_i + \hat{X}_i \hat{P}_i) \ln \sqrt{m_i(t)} \right], \quad (5.18)$$

$$\hat{U}_2(t) = \exp \left[-\frac{i}{4\hbar} \sum_{i=1}^3 \frac{\dot{m}_i(t)}{m_i(t)} \hat{X}_i^2 \right]. \quad (5.19)$$

En utilisant cet opérateur, nous transformons l'invariant $\hat{O}(t)$ comme

$$\hat{\mathcal{O}}(t) = \hat{U}^{-1}(t) \hat{O}(t) \hat{U}(t). \quad (5.20)$$

Ensuite, après une évaluation simple, nous obtenons

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{O}}(t) = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left[\hat{P}_i^2 + \left(\frac{\int_0^t \omega_i^2(t) \dot{m}_i(t) dt}{m_i(t)} - \left[\frac{\dot{m}_i(t)}{4m_i(t)} \right]^2 \right) \hat{X}_i^2 \right] \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\int_0^t k_{12}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} \right) dt}{\sqrt{m_1(t)m_2(t)}} \right) \hat{X}_1 \hat{X}_2 \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\int_0^t k_{13}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)} \right) dt}{\sqrt{m_1(t)m_3(t)}} \right) \hat{X}_1 \hat{X}_3 \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{\int_0^t k_{23}(t) \left(\frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)} \right) dt}{\sqrt{m_2(t)m_3(t)}} \right) \hat{X}_2 \hat{X}_3. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Remarquons que, malgré l'élimination des coefficients m_i^{-1} associés aux termes \hat{P}_i^2 dans l'opérateur invariant original (5.16), le nouveau invariant transformé $\hat{\mathcal{O}}(t)$ contient toujours des termes interactifs de couplage $\hat{X}_i \hat{X}_j$. La suppression des termes interactifs dans l'équation (5.21) est très utile pour évaluer les états et les valeurs propres de l'opérateur invariant. Pour cette raison, nous faisons appel à une autre technique mathématique, qui est la diagonalisation de l'opérateur invariant.

5.4 Diagonalisation de l'opérateur invariant

Une telle suppression peut être réalisée en diagonalisant l'opérateur invariant après l'avoir converti en une matrice équivalente.

En effet la représentation matricielle de l'équation (5.21) est donné par l'expression

$$\hat{O}(t) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \hat{P}_i \delta_{ij} \hat{P}_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \hat{X}_i \mathbb{k}_{ij} \hat{X}_j, \quad (5.22)$$

où $\delta_{ij} = 1$ for $i = j$, tandis que $\delta_{ij} = 0$ pour $i \neq j$, où les deux matrices sont représentées comme

$$\mathbb{k} = \begin{pmatrix} \varpi_1^2 & \frac{1}{2}K_{12} & \frac{1}{2}K_{13} \\ \frac{1}{2}K_{12} & \varpi_2^2 & \frac{1}{2}K_{23} \\ \frac{1}{2}K_{13} & \frac{1}{2}K_{23} & \varpi_3^2 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

tel que les paramètres impliqués sont donnés par

$$\varpi_i = \left(\frac{\int_0^t \omega_i^2(t) \dot{m}_i(t) dt}{m_i(t)} - \left[\frac{\dot{m}_i(t)}{4m_i(t)} \right]^2 \right)^{1/2}, \quad (5.24)$$

$$K_{12} = \frac{\int_0^t k_{12}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} + \frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} \right) dt}{\sqrt{m_1(t)m_2(t)}}, \quad (5.25)$$

$$K_{13} = \frac{\int_0^t k_{13}(t) \left(\frac{\dot{m}_1(t)}{m_1(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)} \right) dt}{\sqrt{m_1(t)m_3(t)}}, \quad (5.26)$$

$$K_{23} = \frac{\int_0^t k_{23}(t) \left(\frac{\dot{m}_2(t)}{m_2(t)} + \frac{\dot{m}_3(t)}{m_3(t)} \right) dt}{\sqrt{m_2(t)m_3(t)}}. \quad (5.27)$$

Nous remarquons que la matrice \mathbb{k} est une matrice carrée [78, 79], et pour cette raison on peut la diagonaliser². Et pour ce faire, il faut chercher des formes carrées de ses valeurs

²En général, cette propriété est équivalente à l'existence d'une base de vecteurs propres définie dans un endomorphisme diagonalisable de l'espace vectoriel.

propres Ω_i^2 et les vecteurs propres correspondants \vec{V}_i . Par conséquent, la représentation diagonalisée de \mathbb{k} est représentée sous la forme

$$\mathbb{R}^{-1}\mathbb{k}\mathbb{R} = \begin{pmatrix} \Omega_1^2 & 0 & 0 \\ 0 & \Omega_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & \Omega_3^2 \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

Maintenant nous évaluons Ω_i^2 avec ses vecteurs propres \vec{V}_i . Pour cela, nous considérons l'équation des valeurs propres

$$(\mathbb{k} - \Omega_i^2 I) \vec{V}_i = 0, \quad (5.29)$$

où I est la matrice d'identité. Considérant que les valeurs propres de la matrice \mathbb{k} sont des valeurs α , nous pouvons écrire l'équation (5.29) comme

$$|\mathbb{k} - \alpha I| = (\Omega_1^2 - \alpha) (\Omega_2^2 - \alpha) (\Omega_3^2 - \alpha) = 0. \quad (5.30)$$

Alors, les valeurs propres de la matrice \mathbb{k} sont obtenues comme suit

$$\Omega_1^2 = \varpi_1^2 + (K_{12} + K_{13})/2, \quad (5.31)$$

$$\Omega_2^2 = \varpi_2^2 - \frac{1}{2}K_{23} + \Omega^2, \quad (5.32)$$

$$\Omega_3^2 = \varpi_3^2 - \frac{1}{2}K_{23} - \Omega^2, \quad (5.33)$$

où

$$\Omega^2 = \frac{1}{2} [K_{12}^2 + K_{13}^2 + K_{23}^2 - (K_{12}K_{13} + K_{12}K_{23} + K_{13}K_{23})]^{1/2}. \quad (5.34)$$

A partir d'une évaluation simple, chaque vecteur propre lié à Ω_i^2 est donné par

$$\vec{V}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

$$\vec{V}_2 = \lambda_+ \begin{pmatrix} \frac{1}{2}K_{12} - \frac{1}{2}K_{23} - \Omega^2 \\ \frac{1}{2}K_{23} - \frac{1}{2}K_{12} + \Omega^2 \\ \frac{1}{2}K_{23} - \frac{1}{2}K_{13} \end{pmatrix}, \quad (5.36)$$

$$\vec{V}_3 = \lambda_- \begin{pmatrix} \frac{1}{2}K_{12} - \frac{1}{2}K_{23} + \Omega^2 \\ \frac{1}{2}K_{23} - \frac{1}{2}K_{12} - \Omega^2 \\ \frac{1}{2}K_{23} - \frac{1}{2}K_{13} \end{pmatrix}, \quad (5.37)$$

où

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{K_{23} - K_{13}} \left[\frac{2}{3} \pm \frac{K_{12} - (K_{13} + K_{23})/2}{3\Omega^2} \right]^{1/2}. \quad (5.38)$$

Des vecteurs propres similaires sont introduits dans la Ref [72] mais pour un hamiltonien au lieu de l'invariant. D'autre part, la forme matricielle de \mathbb{R} s'écrit comme un bloc des vecteurs colonnes

$$\begin{aligned} \mathbb{R} &= \begin{pmatrix} \vec{V}_1 \vec{V}_2 \vec{V}_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} & \lambda_+ [\frac{1}{2}K_{12} - \frac{1}{2}K_{23} - \Omega^2] & \lambda_- [\frac{1}{2}K_{12} - \frac{1}{2}K_{23} + \Omega^2] \\ 1/\sqrt{3} & \lambda_+ [-\frac{1}{2}K_{12} + \frac{1}{2}K_{23} + \Omega^2] & \lambda_- [-\frac{1}{2}K_{12} + \frac{1}{2}K_{23} - \Omega^2] \\ 1/\sqrt{3} & \lambda_+ [-\frac{1}{2}K_{13} + \frac{1}{2}K_{23}] & \lambda_- [-\frac{1}{2}K_{13} + \frac{1}{2}K_{23}] \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.39)$$

Maintenant, en termes de nouvelles coordonnées

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \mathbb{R} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \mathbb{R} \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \end{pmatrix}, \quad (5.40)$$

l'opérateur invariant diagonalisé $\hat{\mathcal{O}}$ prend la forme

$$\hat{\mathcal{O}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (\hat{p}_i^2 + \Omega_i^2 \hat{x}_i^2). \quad (5.41)$$

Ici, les expressions complètes de \hat{x}_i sont données par

$$\hat{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{X}_1 + \frac{\lambda_+}{2} (K_{12} - K_{23} - 2\Omega^2) \hat{X}_2 + \frac{\lambda_-}{2} (K_{12} - K_{23} + 2\Omega^2) \hat{X}_3, \quad (5.42)$$

$$\hat{x}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{X}_1 + \frac{\lambda_+}{2} (K_{23} - K_{12} + 2\Omega^2) \hat{X}_2 + \frac{\lambda_-}{2} (K_{23} - K_{12} - 2\Omega^2) \hat{X}_3, \quad (5.43)$$

$$\hat{x}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \hat{X}_1 + \frac{\lambda_+}{2} (K_{23} - K_{13}) \hat{X}_2 + \frac{\lambda_-}{2} (K_{23} - K_{13}) \hat{X}_3, \quad (5.44)$$

et les moments conjugués \hat{p}_i sont également représentés de la même manière.

Nous remarquons que l'équation (5.41) est une somme de trois oscillateurs harmoniques simples avec des masses égales à l'unité. Nous pouvons facilement étudier l'invariant diagonalisé en raison de sa simplicité. Et il est possible de résoudre l'équation de ses valeurs propres sans difficulté.

5.5 Application en mécanique quantique

Jusqu'à ici, nous avons construit un opérateur invariant pour les trois oscillateurs couplés et nous l'avons diagonalisé. Nous pouvons facilement trouver les solutions de l'équation des valeurs propres de l'opérateur invariant diagonalisé. Et par conséquent, les états propres de cet invariant nous permettra d'étudier des diverses propriétés mécaniques du système. Nous l'appliquerons, dans cette section, au problème de la mécanique quantique du système à titre d'exemple. Les fonctions d'onde exactes du système original seront dérivées à partir des fonctions propres de l'invariant simplifié.

5.5.1 Etats propres de l'invariant

Pour la description quantique du système, il peut être nécessaire de trouver les fonctions propres de l'opérateur invariant car elles sont étroitement liées aux fonctions d'ondes quantiques du système original. Plus clairement, les fonctions d'ondes quantiques pour les systèmes oscillatoires dépendants du temps sont représentées en termes de fonctions propres selon la théorie des invariants [5, 6, 7].

Il est clair que l'équation (5.41) est la même que l'hamiltonien associé aux trois oscillateurs harmoniques indépendants. Par conséquent, les fonctions propres de l'opérateur invariant diagonalisé sont les mêmes que celles de l'hamiltonien pour l'oscillateur (3D) dé-couplé. A partir de la transformation inverse, il peut être possible d'obtenir les fonctions propres de l'opérateur invariant original. Grâce à une procédure mathématique rigoureuse, nous allons le démontrer dans cette section. De plus, nous montrerons également que les fonctions d'onde du système peuvent être obtenues en utilisant de telles fonctions propres.

Afin d'obtenir les valeurs propres de l'opérateur invariant $\hat{O}(t)$, nous introduisons d'abord les opérateurs canoniques d'annihilation et de création \hat{b}_i and \hat{b}_i^\dagger associés à l'opérateur invariant transformé :

$$\hat{b}_i = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\Omega_i} \hat{x}_i + \frac{i}{\sqrt{\Omega_i}} \hat{p}_i \right), \quad (5.45)$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\Omega_i} \hat{x}_i - \frac{i}{\sqrt{\Omega_i}} \hat{p}_i \right). \quad (5.46)$$

Notons que ces opérateurs obéissent à la règle de commutation canonique habituelle du boson, qui est $[\hat{b}_i, \hat{b}_i^\dagger] = 1$. Ensuite, l'équation (5.41) peut être exprimé en termes de \hat{b}_i et \hat{b}_i^\dagger comme

$$\hat{O} = \sum_{i=1}^3 \hbar \Omega_i \left(\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i + \frac{1}{2} \right). \quad (5.47)$$

Nous considérons maintenant la transformation unitaire inverse :

$$\hat{O}(t) = \hat{U}(t)\hat{O}\hat{U}^{-1}(t) \quad , \quad \hat{a}_i(t) = \hat{U}(t)\hat{b}_i\hat{U}^{-1}(t) \quad , \quad \hat{a}_i^\dagger(t) = \hat{U}(t)\hat{b}_i^\dagger\hat{U}^{-1}(t) . \quad (5.48)$$

Notons que cette transformation change \hat{X}_i et \hat{P}_i comme

$$\hat{X}_i \longrightarrow \hat{U}(t)\hat{X}_i\hat{U}^{-1}(t) = \sqrt{m_i(t)}\hat{X}_i, \quad (5.49)$$

$$\hat{P}_i \longrightarrow \hat{U}(t)\hat{P}_i\hat{U}^{-1}(t) = \frac{1}{\sqrt{m_i(t)}} \left(\hat{P}_i + \frac{\dot{m}_i(t)}{2}\hat{X}_i \right). \quad (5.50)$$

Pour cette raison, l'opérateur invariant (5.16), peut être réécrit sous la forme

$$\hat{O}(t) = \sum_{i=1}^3 \hbar\Omega_i \left[\hat{a}_i^\dagger(t)\hat{a}_i(t) + \frac{1}{2} \right], \quad (5.51)$$

où $\hat{a}_i(t)$ et $\hat{a}_i^\dagger(t)$ sont les opérateurs d'annihilation et de création canoniques dépendants du temps exprimés comme

$$\hat{a}_1(t) = \left(\frac{\Omega_1}{2} \right)^{1/2} \hat{X}_+ + i \left(\frac{1}{2\Omega_1} \right)^{1/2} \hat{P}_+, \quad (5.52)$$

$$\hat{a}_1^\dagger(t) = \left(\frac{\Omega_1}{2} \right)^{1/2} \hat{X}_+ - i \left(\frac{1}{2\Omega_1} \right)^{1/2} \hat{P}_+, \quad (5.53)$$

$$\hat{a}_2(t) = \left(\frac{\Omega_2}{2} \right)^{1/2} \hat{X}_- + i \left(\frac{1}{2\Omega_2} \right)^{1/2} \hat{P}_-, \quad (5.54)$$

$$\hat{a}_2^\dagger(t) = \left(\frac{\Omega_2}{2} \right)^{1/2} \hat{X}_- - i \left(\frac{1}{2\Omega_2} \right)^{1/2} \hat{P}_-, \quad (5.55)$$

$$\hat{a}_3(t) = \left(\frac{\Omega_3}{2} \right)^{1/2} \hat{X}_0 + i \left(\frac{1}{2\Omega_3} \right)^{1/2} \hat{P}_0, \quad (5.56)$$

$$\hat{a}_3^\dagger(t) = \left(\frac{\Omega_3}{2} \right)^{1/2} \hat{X}_0 - i \left(\frac{1}{2\Omega_3} \right)^{1/2} \hat{P}_0, \quad (5.57)$$

avec

$$\begin{aligned}\hat{X}_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{m_1(t)}\hat{X}_1 \pm \frac{\lambda_+}{2}(K_{12} - K_{23} - 2\Omega^2)\sqrt{m_2(t)}\hat{X}_2 \\ &\quad \pm \frac{\lambda_-}{2}(K_{12} - K_{23} + 2\Omega^2)\sqrt{m_3(t)}\hat{X}_3,\end{aligned}\tag{5.58}$$

$$\begin{aligned}\hat{P}_{\pm} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{m_1(t)}}\left(\hat{P}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2}\hat{X}_1\right) \\ &\quad \pm \frac{\lambda_+}{2}(K_{12} - K_{23} - 2\Omega^2)\frac{1}{\sqrt{m_2(t)}}\left(\hat{P}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2}\hat{X}_2\right) \\ &\quad \pm \frac{\lambda_-}{2}(K_{12} - K_{23} + 2\Omega^2)\frac{1}{\sqrt{m_3(t)}}\left(\hat{P}_3 + \frac{\dot{m}_3(t)}{2}\hat{X}_3\right),\end{aligned}\tag{5.59}$$

$$\begin{aligned}\hat{X}_0 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{m_1(t)}\hat{X}_1 + \frac{\lambda_+}{2}(K_{23} - K_{13})\sqrt{m_2(t)}\hat{X}_2 \\ &\quad + \frac{\lambda_-}{2}(K_{23} - K_{13})\sqrt{m_3(t)}\hat{X}_3,\end{aligned}\tag{5.60}$$

$$\begin{aligned}\hat{P}_0 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{m_1(t)}}\left(\hat{P}_1 + \frac{\dot{m}_1(t)}{2}\hat{X}_1\right) \\ &\quad + \frac{\lambda_+}{2}(K_{23} - K_{13})\frac{1}{\sqrt{m_2(t)}}\left(\hat{P}_2 + \frac{\dot{m}_2(t)}{2}\hat{X}_2\right) \\ &\quad + \frac{\lambda_-}{2}(K_{23} - K_{13})\frac{1}{\sqrt{m_3(t)}}\left(\hat{P}_3 + \frac{\dot{m}_3(t)}{2}\hat{X}_3\right).\end{aligned}\tag{5.61}$$

Comme il est connu, les états propres des opérateurs $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ sont $|n_i, t\rangle$. Par conséquent les valeurs propres correspondants sont données par

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i |n_i, t\rangle = n_i |n_i, t\rangle,\tag{5.62}$$

où $n_i = 0, 1, 2, \dots$. Ensuite, on confirme facilement que les valeurs propres de l'équation (5.51) est représenté en termes de n_i et Ω_i

$$\lambda_{n_1, n_2, n_3} = \sum_{i=1}^3 \hbar \Omega_i \left(n_i + \frac{1}{2}\right).\tag{5.63}$$

Les états propres complets de \hat{O} est écrit comme un produit de trois états propres

qui peuvent être évalués à partir des états propres du vide $|0, 0, 0, t\rangle$

$$\begin{aligned} |n_1, n_2, n_3, t\rangle &= |n_1, t\rangle \otimes |n_2, t\rangle \otimes |n_3, t\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!n_3!}} (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2^\dagger)^{n_2} (\hat{a}_3^\dagger)^{n_3} |0, 0, 0, t\rangle. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Il est évident que les états propres $|n_1, n_2, n_3, t\rangle$ obéissent à la condition de normalisation

$$\langle n_1, n_2, n_3, t | n'_1, n'_2, n'_3, t\rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \delta_{n_3, n'_3}. \quad (5.65)$$

5.5.2 Fonctions d'ondes de l'hamiltonien original

Selon la théorie de Lewis-Riesenfeld, les fonctions d'onde $|\psi_{n_1, n_2, n_3}(t)\rangle$ du système sont représentées en termes d'états propres dérivés dans la section précédente :

$$|\psi_{n_1, n_2, n_3}(t)\rangle = e^{i\zeta_{n_1, n_2, n_3}(t)} |n_1, n_2, n_3, t\rangle, \quad (5.66)$$

où $\zeta_{n_1, n_2, n_3}(t)$ sont des facteurs de phases. Jusqu'à présent, la solution quantique de notre problème n'est pas complète, car la fonction d'onde qui décrit l'évolution du système physique, c'est celle de l'équation de Schrödinger dépendant du temps suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_{n_1, n_2, n_3}(t)\rangle = \hat{H} |\psi_{n_1, n_2, n_3}(t)\rangle. \quad (5.67)$$

Une évaluation mineure après l'insertion de l'équation (5.66) dans l'équation ci-dessus conduit à

$$\frac{\partial}{\partial t} \zeta_{n_1, n_2, n_3}(t) = \frac{1}{\hbar} \langle n_1, n_2, n_3, t | \left(\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) |n_1, n_2, n_3, t\rangle. \quad (5.68)$$

En résolvant cette équation de manière simple, nous avons

$$\zeta_{n_1, n_2, n_3}(t) = \sum_{i=1}^3 \Omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) t. \quad (5.69)$$

Enfin, les fonctions d'onde dans l'espace de configuration sont écrit sous la forme

$$\begin{aligned}
\langle \hat{X}_1, \hat{X}_2, \hat{X}_3 \mid \psi_{n_1, n_2, n_3}(t) \rangle &= \prod_{i=1}^3 \left[\left(\frac{\sqrt{\Omega_i m_i(t)}}{(\pi \hbar)^{1/2} n_i! 2^{n_i}} \right)^{1/2} H_{n_i}(\mu_i) \right] \\
&\times \exp \left\{ - \sum_{i=1}^3 \left[\left(\frac{\Omega_i}{2\hbar} + \frac{i\dot{m}_i(t)}{4\hbar m_i(t)} \right) \sum_{j=1}^3 \left(\mathbb{R}_{ij} \sqrt{m_j(t)} X_j \right)^2 \right] \right\} \\
&\times \exp \left[-i \sum_{i=1}^3 \Omega_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) t \right], \tag{5.70}
\end{aligned}$$

tel que les paramètres μ_i sont exprimés comme suit

$$\begin{aligned}
\mu_1 &= \left(\frac{\Omega_1}{\hbar} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{m_1(t)} X_1 + \frac{\lambda_+}{2} (K_{12} - K_{23} - 2\Omega^2) \sqrt{m_2(t)} X_2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{\lambda_-}{2} (K_{12} - K_{23} + 2\Omega^2) \sqrt{m_3(t)} X_3 \right], \tag{5.71}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mu_2 &= \left(\frac{\Omega_2}{\hbar} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{m_1(t)} X_1 + \frac{\lambda_+}{2} (K_{23} - K_{12} + 2\Omega^2) \sqrt{m_2(t)} X_2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{\lambda_-}{2} (K_{23} - K_{12} - 2\Omega^2) \sqrt{m_3(t)} X_3 \right], \tag{5.72}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mu_3 &= \left(\frac{\Omega_3}{\hbar} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{m_1(t)} X_1 + \frac{\lambda_+}{2} (K_{23} - K_{13}) \sqrt{m_2(t)} X_2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{\lambda_-}{2} (K_{23} - K_{13}) \sqrt{m_3(t)} X_3 \right]. \tag{5.73}
\end{aligned}$$

Notons que μ_i ne sont pas seulement des fonctions de variables de position X_i , mais varient également en fonction du temps. Bien que les fonctions d'onde totale (5.70), sont quelque peu compliqués, elles jouent un rôle important pour évaluer non seulement les valeurs moyennes de diverses observables telles que le moment et l'énergie quantiques, mais aussi la distribution de probabilité, l'intrication des systèmes, et le propagateur.

6. Conclusion

Le sujet de cette thèse s'articule essentiellement sur la théorie des invariants en mécanique quantique et son application à la résolution de certains problèmes dépendants du temps. Nous avons considéré deux modèles d'oscillateurs couplés à deux et trois dimensions avec masses et fréquences dépendant du temps.

Ainsi, après une introduction exhaustive, nous avons commencé ce travail, dans le chapitre 1, par un exposé général et détaillé sur l'équation de Schrödinger en mécanique quantique. Nous avons en particulier présenté les méthodes utilisées pour trouver la solution de cette équation dans le cas stationnaire et le cas dépendant du temps. Nous avons consacré le chapitre 2 à un rappel plus ou moins détaillé sur la théorie des invariants, son fondement et ses applications.

Dans le chapitre 3, nous avons étudié la dynamique quantique d'un système oscillatoire couplé dépendant du temps à partir de son hamiltonien sur la base de la méthode des opérateurs invariants. L'opérateur invariant quantique du système a été obtenu en utilisant les opérateurs de création et d'annihilation, l'opérateur invariant est représenté comme une forme simple conventionnelle. Les fonctions propres de l'opérateur invariant quantique ont été dérivées dans l'état de Fock et elles sont identiques aux celles de $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$. Nous avons établi un opérateur de transformation unitaire qui relie les fonctions propres du système dépendant du temps à celles de l'oscillateur harmonique simple 2D. Cet opérateur nous a permis de dériver des solutions quantiques du système à travers la relation de transformation. Les fonctions d'onde qui ne diffèrent que par des phases dépendant du temps $\alpha_{n_1 n_2}(t)$ avec les fonctions propres de l'opérateur invariant. Pour illustrer notre calcul, nous l'avons appliquée à un cas simple où les masses augmentent de façon exponentielle avec le temps.

Le système que nous avons considéré dans le chapitre 4 est consacré au système de trois oscillateurs couplés généralisés. Nous avons étudié le cas où leurs paramètres tels que les masses, les fréquences et les termes de couplage varient explicitement avec le temps. Nous avons adopté une approche alternative basée sur la méthode de transformation uni-

taire qui nous a permis de transformer l'hamiltonien quantique d'origine dépendant du temps en un hamiltonien égal mais simple représenté par trois oscillateurs harmoniques couplés avec des fréquences dépendant du temps $\varpi_1(t)$, $\varpi_2(t)$ et $\varpi_3(t)$ et les masses égales à l'unité. Pour diagonaliser l'hamiltonien transformé en éliminant les termes de couplage $X_i X_j$. Pour cette raison nous avons effectué une autre transformation unitaire qui correspond à des rotations tridimensionnelles paramétrées par trois angles d'Euler (ϕ, θ, φ) . Selon ce découplage, nous avons développé une dynamique complète de l'ensemble du système en examinant simplement chaque oscillateur indépendamment. Un tel développement de la théorie mécanique peut se faire indépendamment de la complication des variations des paramètres.

Dans le dernier chapitre, l'opérateur invariant de trois oscillateurs couplés dépendant du temps a été étudié. En partant de la formulation de l'invariant classique, nous avons obtenu l'opérateur invariant quantique du système. Il a été montré que l'opérateur invariant obéit à l'équation de Liouville-von Neumann. Nous avons également étudié la diagonalisation de l'opérateur invariant. Comme étape préliminaire avant la diagonalisation de l'opérateur invariant, nous avons effectué une approche alternative basée sur la transformation unitaire de celui-ci; cette procédure nous a permis de transformer l'opérateur invariant quantique en un opérateur simple, qui est représenté par trois oscillateurs harmoniques couplés avec des fréquences dépendant du temps et des masses égales à l'unité. Cependant, l'opérateur invariant transformé contient toujours les termes de couplage $\hat{X}_i \hat{X}_j$. Ces termes ont été éliminés par la diagonalisation éventuelle de la représentation matricielle de l'invariant.

L'invariant diagonalisé est réduit à un système de trois oscillateurs simples. Puisque l'opérateur invariant du système est représenté simplement en termes d'opérateurs de création et d'annihilation $(\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i)$, il est possible d'identifier les états propres de l'opérateur invariant. A l'aide de ces états propres, les fonctions d'onde satisfaisant l'équation de Schrödinger ont été obtenues comme il est indiqué dans l'équation (5.70).

Cependant, les fonctions d'onde dans le système d'origine sont quelque peu compli-

quées. Ces fonctions d'onde peuvent être utilisées pour évaluer non seulement les valeurs moyennes de diverses observables en mécanique quantique telles que la quantité de mouvement physique et l'énergie quantique, mais aussi les densités de probabilité, les fluctuations des variables canoniques, l'intrication des systèmes et le propagateur.

En particulier, la dynamique d'intrication entre les éléments des trois oscillateurs nano-optomécaniques ou multicouplés peuvent être étudiés sur la base de nos recherches. La création et le contrôle de l'intrication dans les oscillateurs optomécaniques quantiques couplés est un sujet crucial dans la réalisation du traitement de l'information quantique en cryptographie quantique et en informatique quantique [82].

Bibliographie

- [1] L. D. Landau, E. Lifchiz, *Mécanique quantique*, Editions Mir, Moscou, (1973).
- [2] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Mécanique quantique T2*, Hermann, Paris,(1977).
- [3] A. Messiah, *Mécanique quantique T2*, Dunod, Paris, (1995).
- [4] W. Greiner, *Quantum Mechanics* : 4 Ed , Springer, Germany, (2000) .
- [5] H. R. Lewis,Jr, Classical and Quantum Systems with Time-Dependent Harmonic-Oscillator-Type Hamiltonians, *Phys. Rev. Letters.* 18, 510, 636 (1967). DOI :10.1103/PhysRevLett.18510.
- [6] H. R. Lewis,Jr, Class of Exact Invariants for Classical and Quantum Time-Dependent Harmonic Oscillators, *J. Math. Phys.* 9, 1976 (1968). DOI :10.1063/1.1664532.
- [7] H. R. Lewis 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 (1969). DOI :10.1063/1.1664991.
- [8] C. J. Garrison and E. M. Wright, Complex geometrical phases for dissipative systems, *Phys. Lett. A* 128 177(1988). DOI :10.1016/0375-9601(88)90905-X.
- [9] A. Mostafazadeh, A new class of adiabatic cyclic states and geometric phases for non-Hermitian Hamiltonians, *Phys. Lett. A* 264 11 (1999). DOI :10.1016/S0375-9601(99)00790-2.

- [10] X. C. Gao, J. B. Xu and T. Z. Qian Gao, Invariants and geometric phase for systems with non-Hermitian time-dependent Hamiltonians, *Phys. Rev. A* 46 3626 (1992). DOI :10.1103/PhysRevA.46.3626.
- [11] H. Choutri, M. Maamache and S. Menouar, Geometric Phase for a Periodic Non-Hermitian Hamiltonian, *J. Kor. Phys. Soc.*, 40 358 (2002). <https://www.jkps.or.kr/journal/view.html?uid=4860&vmd=Full>
- [12] C. M. Bender and S. Boettcher, Real spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having Symmetry, *Phys. Rev. Lett.* 80, 5243 (1998). DOI :10.1103/PhysRevLett.80.5243.
- [13] C. M. Bender, PT symmetry in quantum physics : From a mathematical curiosity to optical experiments, *Eur. Phys. News.* 47, 2, 17 (2016). DOI :10.1051/epn/2016201.
- [14] 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 (2002). DOI :101063/1.1489072.
- [15] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermiticity versus PT-symmetry. II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with a real spectrum, *J. Math. Phys.* 43, 2814 (2002). DOI :101063/1.1461427.
- [16] S. Hassoul, S. Menouar and J. R. Choi, Quantum dynamics of a general time-dependent coupled oscillator, *Mod. Phys. Lett B*, 35, (14) 2150230 (2021). DOI :10.1142/S0217984921502304.
- [17] S. Hassoul, S. Menouar, H. Benseridi and J. R. Choi, Dynamical Invariant Applied on General Time-Dependent Three Coupled Nano-Optomechanical Oscillators, *J. Nanomaterials* (2021), 9 (2021). DOI :10.1155/2021/6903563.
- [18] A. Messiah, *Mécanique Quantique T1*, Dunod, Paris, (1995).
- [19] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique T1*, Hermann, Paris, (1977).
- [20] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, (1995).

- [21] M.V. Berry, Quantal phase factors accompanying adiabatic changes, *Proc. R. Soc. Lond. A.* 392 (1984).doi : 10.1098/rspa.1984.0023
- [22] F. Schwabl , *Quantum Mechanics*, Springer, (2007). <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-73675-2>
- [23] Y. Aharonov and J. Anandan, Phase change during a cyclic quantum evolution, *Phys. Rev. Lett.* 58, 1593 (1987). DOI :10.1103/PhysRevLett.581593.
- [24] L. Landau, E .Lifchitz, *Mécanique*, édition Mir, Moscou, (1988) .
- [25] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, (1980).
- [26] K. Haug, *Statistical Mécanics*, John Wiley et sons, Singapore, (1987).
- [27] C. N. Go et H. N. Go, *Physics statistique à l'équilibre et hors d'équilibre*, Masson, Paris , (1995).
- [28] L. D. Landau ,E. M. Lifshitz, *Physique statistique*,1ère partie, Edition Mir, Moscou (1984).
- [29] S. Menouar, *Thèse de Doctorat en Sciences*, Université de Sétif1, (2009).
- [30] G. Dattoli, M. Richetta, G. Schettini, and A. Torre, Lie algebraic methods and solutions of linear partial differential equations, *J. Math. Phys*, 31, 2856 (1990). doi : 10.1063/1.528937.
- [31] D. Leibfried, D. M. Meekhof, B. E. King , C. Monroe, W. M. Itano and D. J. Wineland, Experimental Determination of the Motional Quantum State of a Trapped Atom, *Phys. Rev. Lett.*77 4281(1996). DOI :10.1103/PhysRevLett 77.4281.
- [32] P. Bertet, A. Auffeves, P. Maioli, S. Osnaghi, T. Meunier, M. Brune, J. M. Raimond and S. Haroche, Direct Measurement of the Wigner Function of a One-Photon Fock State in a Cavity, *Phys.Rev. Lett.* 89 200402 (2002). DOI :10.1103/PhysRevLett.89.200402.
- [33] V .V. Dodonov and A. B. Klimov, Dispersion Interactions between Neutral Atoms and the Quantum Electrodynamical Vacuum, *Phys. Rev. A* 53 2664 (1996). DOI :10.1103/PhysRevA.53.2664.

- [34] J. Casanova, R. Puebla, H. Moya-Cessa and M. B. Plenio, *npj Quant. Inf.* 5, Connecting nth order generalised quantum Rabi models : Emergence of nonlinear spin-boson coupling via spin rotations, 47 (2018). DOI :10.1038/s41534-0096-9.
- [35] J. R. Ray, Exact solutions to the time-dependent Schrödinger equation, *Phys. Rev. A*, 22, 729 (1982). DOI :10.1103/PhysRevA.26.729.
- [36] K. E. Thylwe and H. J. Korsch, The ‘Ermakov - Lewis’ invariants for coupled linear oscillators, *J. Phys. A*, 31, L279-L285 (1998). DOI :10.1088/0305-4470/31/14/002.
- [37] C.M.Cheng and P. C. W. Fung, The evolution operator technique in solving the Schrodinger equation, and its application to disentangling exponential operators and solving the problem of a mass-varying harmonic oscillator, *J. Phys. A : Math. Gen.* 21, 4115 (1988). <https://doi.org/10.1088/0305-4470/21/22/015>
- [38] H. Moya-Cessa and M. Fernandez Guasti, Time dependent quantum harmonic oscillator subject to a sudden change of mass : continuous solution, *Rev. Mex. Fis.* 53 42-6 (2007). http://www.scielo.org.mx/scielo.php?pid=S0035-001X2007000100007&script=sci_arttext
- [39] I. A. Pedrosa, G. P. Serra, and I. Guedes, Wave functions of a time-dependent harmonic oscillator with and without a singular perturbation, *Phys. Rev. A* 56, 4300 (1997). DOI :10.1103/PhysRevA.56.4300.
- [40] I. A. Pedrosa, Exact wave functions of a harmonic oscillator with time-dependent mass and frequency, *Phys. Rev. A* 55, 3219 (1997). DOI :10.1103/PhysRevA.55.3219.
- [41] M. A. de Ponte and A. C. Santos, Adiabatic quantum games and phase-transition-like behavior between optimal strategies, *Quant. Inf. Proc.* 17, 149 (2018). DOI :10.1007/s11128-018-1918-6.
- [42] E Pinney, *The nonlinear differential equation $y'' + p(x)y + cy^{-3} = 0$* , *Proc. Am. Math. Soc.* 1, 681 (1950). DOI :10.1090/S0002-9939-1950-0037979-4.
- [43] P. Caldirola, *Nuovo Cimento*, Forze non conservative nella meccanica quantistica, 18, 394 (1941). DOI :10.1007/BF02960144.

- [44] E. Kanai, On the Quantization of the Dissipative Systems, *Prog. Theor. Phys.* 3, 440 (1948). DOI :10.1143/ptp/3.4.440.
- [45] K. M. Ng and C. F. Lo, Coherent-state propagator of two coupled generalized time-dependent parametric oscillators, *Phys. Lett. A* 230,144 (1997). [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(97\)00212-0](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(97)00212-0)
- [46] Y.S. Kim, M.E. Noz, and S.H. Oh, A simple method for illustrating the difference between the homogeneous and inhomogeneous Lorentz groups, *Am. J. Phys.* 47, 892 (1979). DOI :10.1119/1.11622.
- [47] D. Han, Y.S. Kim, and M.E. Noz and Leehwa Yeh, Symmetries of two-mode squeezed states, *Phys. Lett. A* 144, 111 (1989). DOI :10.1063/1.530318.
- [48] Y. S. Kim and E. P. Wigner, *Phys. Lett. A* 147,343 (1990). DOI :10.3390/quantum1020021.
- [49] D. Han, Y. S. Kim, M. E. Noz, and L. Yeh, Symmetries of two-mode squeezed states, *J. Math. Phys.* 34, 5493 (1993). DOI :10.1063/1.530318.
- [50] D. Han, Y. S. Kim, and M. E. Noz, O(3,3)-like symmetries of coupled harmonic oscillators, *J. Math. Phys.* 36, 3940 (1995). DOI :10.1063/1.530940.
- [51] D. Han, Y. S. Kim, and M. E. Noz, Illustrative example of Feynman's rest of the universe, *Am. J. Phys.* 67, 6 (1999). DOI :10.1119/1.19192.
- [52] S. S. Schweber, *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, Row-Peterson, Elmsford, New York, (1961).
- [53] D. Han, Y. S. Kim, and M. E. Noz, Linear canonical transformations of coherent and squeezed states in the Wigner phase space. III. Two-mode states, *Phys. Rev. A* 41, 6233 (1990). DOI :10.1103/PhysRevA.41.6233.
- [54] F. Iachello and S. Oss, Model of n coupled anharmonic oscillators and applications to octahedral molecules, *Phys. Rev. Lett.* 66, 2976 (1991). DOI :10.1103/PhysRevLett.66.2976.

- [55] M. S. Abdalla, Quantum treatment of the time-dependent coupled oscillators, *J. Phys. A : Math. Gen.* 29(9), 1997 (1996). <https://doi.org/10.1088/0305-4470/29/9/015>
- [56] E. M. Khalil, M. S. Abdalla, and A. S. F. Obada, Quantum treatment of two coupled oscillators in interaction with a two-level atom : Parametric amplifier model, *Int. J. Mod. Phys. B* 18, 2325 (2004). <https://doi.org/10.1142/S0217979204025361>
- [57] S. Menouar, M. Maamache, and J. R. Choi, Time-dependent coupled oscillator model for charged particle motion in the presence of a time varying magnetic field, 82(6), *Phys. Scr.* 82, 065004 (2010). DOI :10.1088/0031-8949/82/06/065004.
- [58] S. Menouar, M. Maamache, and J. R. Choi, Time-dependent coupled oscillator model for charged particle motion in the presence of a time varying magnetic field, *Ann. Phys.* 325, 1708 (2010). DOI :10.1016/j.aop.2010.04.01.
- [59] S. Menouar and J R Choi, A hybrid approach for quantizing complicated motion of a charged particle in time-varying magnetic field, *Ann. Phys.* 353, 307(2015). DOI :10.1016/j.aop.2014.11.014.
- [60] S. Zhang, J. R. Choi, C. I. Um and K. H. Yeon, Quantum uncertainties of mesoscopic capacitance coupled circuit, *Phys. Lett. A* 289, 257 (2001). DOI :10.1016/S0375-9601(01)00600-4.
- [61] S. Zhang, J. R. Choi, C. I. Um and K. H. Yeon, Quantum squeezing effect of mesoscopic capacitance–inductance–resistance coupled circuit, *Phys. Lett. A* 294, 319 (2002). DOI :10.1016/S0375-9601(02)00062-2.
- [62] S. Gröblacher, K. Hammerer, M. R. Vanner and M. Aspelmeyer, Observation of strong coupling between a micromechanical resonator and an optical cavity field, *Nature* 460, 724 (2009). DOI :10.1038/nature 08171.
- [63] W. G. van der Wiel, Yu. V. Nazarov, S. De Franceschi, T. Fujisawa, J. M. Elzerman, E. W. G. M. Huizeling, S. Tarucha and L. P. Kouwenhoven, Electromagnetic

- Aharonov-Bohm effect in a two-dimensional electron gas ring, *Phys. Rev. B* 67, 033307 (2003). DOI :10.1103/PhysRevB.67.033307.
- [64] G. Csaba and W. Porod, Coupled oscillators for computing : A review and perspective, *App. Phys. Rev.* 7, 011302 (2020). DOI :10.1063/1.5120412.
- [65] J. R. Choi, Exact quantum theory of noninteracting electrons with time-dependent effective mass in a time-dependent magnetic field, *J. Phys : Condens. Matt.* 15, 823 (2003). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/15/6/309>
- [66] M. S. Abdalla, J. Perina and Krepelka, F Statistical properties of multiphoton time-dependent three-boson coupled oscillators, *J. Opt. Soc. Am. B* 23, 1146 (2006). DOI :10.1364/JOSAB023.001146.
- [67] A. A. Bykov, G. M. Gusev, J. R. Leite, A. K. Bakarov, A. V. Goran, V. M. Kudryashev and A. I. Toropov, Quasiclassical negative magnetoresistance of a two-dimensional electron gas in a random magnetic field, *Phys. Rev. B* 65, 035302 (2001). DOI :10.1103/PhysRevB.65.035302.
- [68] A. Jellal, M. Schreiber and E. H. El Kinani, Two coupled harmonic oscillators on noncommutative plane, *Int. J. Mod. Phys. A* 20,1515 (2005). <https://doi.org/10.1142/S0217751X05020835>
- [69] P. J. Olver, *Classical Invariant Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, (1999). DOI :10.1017/CBO9780511623660.
- [70] M. Borodzik and S. Friedl, *Algebr. Geom. Topol.* 15, 85 (2015). DOI :10.2140/agt.2015.15.85.
- [71] R. Habarrih, A. Jellal and A. Merdaci, Dynamics and Redistribution of Entanglement and Coherence in Three Time-Dependent Coupled Harmonic Oscillators, *Int.J. Geo. Meth. Mod. Phys.* 18, 08, 2150120 (2021).<https://doi.org/10.1142/S0219887821501206>

- [72] D. Park, Dynamics of entanglement in three coupled harmonic oscillator system with arbitrary time-dependent frequency and coupling constants, *Quantum Inf. Process.* 18 (9), 282 (2019). DOI :10.1007/s11128-019-2393-4.
- [73] R. Marx and S. J. Glaser, *J. Magn. Reson.*, Spins swing like pendulums do : an exact classical model for TOCSY transfer in systems of three isotropically coupled spins 1/2 164, 338 (2003). DOI :101016/S1090-7807(03)00238-6.
- [74] A. Merdaci and A. Jellal, Entanglement in three coupled harmonic oscillator, *Phys. Lett. A* 384, 126134 (2019). DOI :10.1016/j.physleta.2019.126134.
- [75] F. C. Lei, M. Gao, C. Du, Q. L. Jing, and G. L. Long, Three-pathway electromagnetically induced transparency in coupled-cavity optomechanical system, *Opt. Express* 23, 11508 (2015). DOI :10.1364/OE.23.011508.
- [76] J. Wei and E. Norman, Lie Algebraic Solution of Linear Differential Equations, *J. Math. Phys.*(N.Y) 4, 575 (1963). DOI :10.1063/1.1703993.
- [77] A. Lohe, Exact time dependence of solutions to the time-dependent Schrödinger equationm, *J. Phys. A : Math. Theor.* 42, 035307 (2009). DOI :10.1088/1751-8113/42/3/035307.
- [78] M. J. Kronenburg, A Method for Fast Diagonalization of a 2x2 or 3x3 Real Symmetric Matrix, *arXiv preprint arXiv :1306.6291*, (2013). DOI :10.48550/arXiv.1306.6291.
- [79] P. B. Denton, S. J. Parke, T. Tao, X. Zhang, Eigenvectors from eigenvalues : A survey of a basic identity in linear algebra, *arXiv preprint arXiv :1908.03795*, (2019). DOI :10.48550/arXiv.1908.03795.
- [80] S. Ghosh, K. S. Gupta, and S. C. L. Srivastava, Entanglement dynamics following a sudden quench : an exact solution, *Eur. phys. Lett.* 120, 50005 (2017). DOI :10.1209/0295-5075/120/50005.

- [81] I. W. Sudiarta and D. J. W. Geldart, Solving the Schrödinger equation using the finite difference time domain method, *J. Phys. A : Math. Theor.* 40, 1885 (2007). DOI :10.1088/1751-8113/40/8/013.
- [82] G. Csaba and W. Porod, Coupled oscillators for computing : A review and perspective, *App. Phys. Rev.* 7, 011302 (2020). DOI :10.1063/1.5120412.
- [83] V. Ermakov, Second order differential equations. Conditions of complete integrability, Kiev University Izvestia, Series III 9, *Univ. Izv. Kiev* 20, 1 (1880).
- [84] P. G. L. Leach and K. Andriopoulos, THE ERMAKOV EQUATION : A COMMENTARY, *Appl. Anal. Discrete Math.* 2, 147 (2008).<http://www.jstor.org/stable/43666975>
- [85] W. E. Milne, The numerical determination of characteristic numbers, *Phys. Rev.* 35, 86367 (1930).<https://doi.org/10.1103/PhysRev.35.863>
- [86] S. Lie, Theorie der transformationsgruppen. *Math. Ann.* 16, 441 (1880).<https://doi.org/10.1007/BF01446218>
- [87] F. M. Mahomed, A. Qadir, Invariant linearization criteria for systems of cubically non linear second-order ordinary differential equations, *J. Math. Phys.* 16, 283 (2009). DOI :10.1142/S1402925109000236.
- [88] A. V. Aminova and N. A-M Aminov, The projective geometric theory of systems of second-order differential equations : straightening and symmetry theorems, *Sb Math*, 201,631 (2010). <https://doi.org/10.1070/SM2010v201n05ABEH004085>
- [89] S.S. Mizrahi, The geometrical phase : An approach through the use of invariants, *Phys. Lett. A*, 9,135, 465 (1989). [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(89\)90746-9](https://doi.org/10.1016/0375-9601(89)90746-9)
- [90] S. Hassoul, S. Menouar, H. Benseridi and J. R. Choi, "Quantum Dynamics for General Time-Dependent Three Coupled Oscillators Based on an Exact Decoupling", unpublished.

Abstract

In this work, we have used invariant theory as an alternative and powerful method to find the exact solution of the Schrödinger equation and to treat exactly certain time-dependent Hamiltonians associated with concrete problems of physics such as the model of time dependent coupled oscillator (2D) and the system described by three coupled time dependent oscillators (3D). The quantum dynamic properties of the coupled time-dependent oscillator are studied on the basis of the theory of two-dimensional (2D) dynamic invariants. The quantum dynamics of three time-dependent coupled oscillators is studied through an alternative approach based on their decoupling using the unit transformation method and the theory of invariants.

Résumé

Dans ce travail, nous avons utilisé la théorie des invariants comme une méthode alternative puissante pour trouver la résolution exacte de l'équation de Schrödinger et traiter exactement certains Hamiltoniens dépendant du temps, associés à des problèmes concrets de physique tels que le modèle de l'oscillateur couplé dépendant du temps à (2D) et le système décrit par trois oscillateurs couplés dépendants du temps (3D). Les propriétés dynamiques quantiques de l'oscillateur couplé dépendant du temps ont été étudiées sur la base de la théorie des invariants dynamiques bidimensionnels (2D). La dynamique quantique de trois oscillateurs couplés dépendant du temps a été étudiée à travers une approche alternative basée sur leur découplage en utilisant la méthode de transformation unitaire et la théorie des invariants.

المخلص

في هذا العمل استخدمنا نظرية الثوابت كبديل وطريقة فعالة لإيجاد الحل الدقيق لمعادلة شرودنجر ودراسة بعض الهاميلتونيات المعتمدة على الزمن والمرتبطة بمشكلات فيزيائية ملموسة مثل نموذج المذبذب المترابط المعتمد على الزمن والنظام الموصوف بثلاثة مذبذبات مرتبطة بالزمن تمت دراسة الخصائص الديناميكية الكمية للمذبذب المقترن المعتمد على الزمن على أساس نظرية الثوابت الديناميكية ثنائية الأبعاد تمت دراسة ديناميكيات الكم لثلاثة مذبذبات مرتبطة من خلال نهج بديل يعتمد على فصلهم باستخدام طريقة تحويل الوحدة ونظرية الثوابت