

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE CONSTANTINE 1  
FACULTE DES SCIENCES EXACTES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

N d'ordre :

Série :

**THESE**

présentée pour obtenir le diplôme de  
**DOCTORAT EN SCIENCES**

Spécialité : Physique théorique

Option : Physique quantique

Par

Melle Berrehail Mounira

**THEME**

Approches des transformations unitaires et des invariants pour  
la résolution de problèmes de mécanique quantique avec  
Hamiltonien dépendant explicitement du temps

devant le jury composé de :

Président : L. GUECHI Prof.	Univ. Constantine 1
Rapporteur : F. BENAMIRA Prof.	Univ. Constantine 1
Examineur : S. R. ZOUZOU Prof.	Univ. Constantine 1
Kh. BOUDJEMAA M.C.A.	Univ. Khenchela
A. BOUNAMES Prof.	Univ. Jijel
M. T. MEFTAH Prof.	Univ. Ouargla

# Remerciement

Ces pages, blanches au moment où je commence à écrire, sont l'occasion de remercier les personnes qui, d'une manière ou d'une autre, sont entrées dans ma vie, y sont restées ou non, mais qui, toutes à leur façon, m'ont apportées un bout de lumière.

Alors, je tiens à te remercier en tout premier lieu, Monsieur Benamira Farid, professeur à l'université de Constantine 1. Merci de m'avoir acceptée en thèse sous ta direction, merci de m'avoir aidé dans mes premiers pas et merci d'avoir corrigé ma thèse.

Je tiens particulièrement à remercier Monsieur Guechi Larbi, professeur à l'université de Constantine 1, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de thèse.

Je tiens à remercier Monsieur Mohammed Tayeb Meftah, professeur à l'université de Kasdi Merbah, qui a bien voulu faire partie du jury.

J'exprime ma profonde gratitude a Monsieur Zouzou Sami Riad, Professeur à l'université de Constantine1, pour avoir bien voulu examiner ce travail.

Je tiens aussi à remercier Monsieur Boudjemaa kheirdine, Maitre de conférences à l'université de Khenchla, pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je remercie également Monsieur Bounames Abdelhafid, Professeur à l'université de Jijel, pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Un grand merci tout particulier à l'ingénieur Salah Ibrahim Khawaldeh de l'université de Jordanie et sa femme Asmaa Al-khassabah, pour leurs aides et leurs encouragements.

Je tiens particulièrement à remercier Monsieur Mohamed Ashour, professeur à l'université de Ain Shames, Egypte, pour son aide et son soutien.

Je remercie également mes amis Shatha arar, Nadhira bioud et son mari Saleh Daoid, pour leur aides. Et évidemment, merci à mes parents pour son amour et son soutien qu'ils m'accordent depuis de longues années.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>4</b>
<b>1 Quelques rappels sur les fondements de la mécanique quantique non relativiste</b>	<b>7</b>
1.1 Brève présentation de la mécanique quantique . . . . .	7
1.2 Outils de base pour la description quantique d'un système physique (particule) . . . . .	8
1.2.1 équation de Schrödinger dépendante du temps . . . . .	9
1.2.2 Superposition d'états . . . . .	10
1.2.3 Opérateur d'évolution . . . . .	10
1.2.4 Incertitudes. Mesure d'un état quantique . . . . .	11
1.3 Méthodes approximatives pour la résolution de l'équation de Schrödinger avec Hamiltonien dépendant explicitement du temps . . . . .	12
1.3.1 Théorie des perturbations dépendants du temps . . . . .	13
1.3.2 Approximation adiabatique . . . . .	14
1.4 Méthodes exactes pour la résolution de l'équation de Schrödinger avec Hamiltonien dépendant explicitement du temps . . . . .	16
1.4.1 opérateur d'évolution . . . . .	16
1.4.2 La méthode des invariants . . . . .	18
1.4.3 Les transformations unitaires . . . . .	18
<b>2 Méthode des invariants et transformations unitaires pour la résolution de problèmes non stationnaires</b>	<b>19</b>
2.1 Introduction . . . . .	19

2.2	Méthode des invariants . . . . .	21
2.2.1	Exposé de la méthode . . . . .	21
2.2.2	Propriété des valeurs propres d'un invariant . . . . .	22
2.2.3	Relation entre les vecteurs propres d'un opérateur invariant et les solutions de l'équation de Schrödinger . . . . .	24
2.2.4	Solution générale de l'équation de Schrödinger . . . . .	26
2.2.5	Construction d'opérateurs invariants . . . . .	27
2.3	Relation entre les fonctions propres d'un invariant et le propagateur de Feynman . . . . .	29
2.4	Transformations unitaires et résolution de l'équation de Schrödinger . . .	30
2.5	Exemple illustratif . . . . .	33
2.6	Conclusion . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Ensembles complets de solutions de l'équation de Schrödinger d'une particule dans le potentiel linéaire dépendant du temps par la méthode des Invariants</b>	<b>41</b>
3.1	Introduction . . . . .	41
3.2	Hamiltonien du système . . . . .	43
3.3	Opérateur invariant . . . . .	45
3.4	Invariant linéaire et ensemble complet de solutions correspondantes . . .	48
3.4.1	Fonctions propres et valeurs propres de l'invariant linéaire $I_L(t)$ .	49
3.4.2	Phases globales et solutions du type onde plane . . . . .	52
3.5	Invariant semi-quadratique et ensemble complet de solutions correspondantes . . . . .	53
3.5.1	Fonctions propres et valeurs propres de $I_{SQ}(t)$ . . . . .	54
3.5.2	Phases globales et solutions du type paquet d'ondes d'Airy . . . .	57
3.6	Invariant quadratique et ensemble complet de solutions correspondantes	58
3.6.1	Fonctions propres et valeurs propres de l'opérateur quadratique $I_Q(t)$	59
3.6.2	Phases globales et solutions du type oscillateur harmonique . . .	65

3.6.3	Valeurs moyennes, écarts quadratiques moyens de la position et l'impulsion de la particule et relations d'incertitudes . . . . .	68
3.7	Relations entre les différentes solutions obtenues . . . . .	71
3.7.1	Relation entre les solutions simples de $I_L$ et celles de $I_{SQ}$ . . . . .	72
3.7.2	Relation entre les solutions simple de $I_L$ et celles de $I_Q$ . . . . .	73
3.8	conclusion . . . . .	75
	<b>Conclusion</b>	<b>76</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>77</b>

# Introduction

Les problèmes dynamiques en mécanique quantique non relativiste et relativiste sont d'un intérêt capital dans différentes branches de la physique et la chimie quantiques. En mécanique quantique non relativiste, il faut résoudre l'équation de Schrödinger associée à un Hamiltonien comme premier pas pour comprendre le comportement quantique du système physique qu'il décrit. 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. Les solutions de l'équation de Schrödinger s'expriment alors comme des fonctions des variables d'espace multipliées par des phases dépendantes du temps.

Pour les Hamiltoniens dépendant explicitement du temps, la séparation des variables spatiales et du temps dans l'équation de Schrödinger associée n'est pas toujours possible et par conséquent la résolution du problème est souvent plus compliquée voire même impossible de façon exacte. En fait, hormis quelques cas extrêmement rares, il n'est en général pas possible de résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger dépendante du temps. On est obligé de faire appel à des méthodes approximatives dont chacune peut être mieux adaptée pour certains types de potentiels. La théorie des perturbations, utilisée pour résoudre approximativement une multitude de potentiels connus en physique, peut être appliquée notamment lorsque le terme dépendant du temps est petit devant les écarts entre les niveaux énergétiques [1]. L'approximation adiabatique est une méthode qui est relativement valable lorsque le terme dépendant du temps dans l'Hamiltonien varie très lentement par rapport à tous les termes caractéristiques du système [2],[3]. Enfin, l'approximation soudaine s'applique notamment pour une certaine catégorie de potentiels où le changement dans l'Hamiltonien occupe un intervalle de temps très court mais fini [2].

En général, dans les méthodes d'approximation, il est supposé qu'on sait résoudre exactement l'équation de Schrödinger relative à la partie prépondérante de l'Hamiltonien. Pour cette raison, la recherche de nouveaux problèmes non stationnaires qui se prêtent à des résolutions exactes demeure toujours un axe de recherche d'actualité et d'intérêt particulier en physique quantique. Par ailleurs, l'introduction de nouvelles méthodes et techniques de résolution de tels problèmes est aussi un sujet de recherche renouvelable et abondamment abordé dans la littérature.

Il est bien connu que la méthode standard pour résoudre exactement l'équation de Schrödinger, pour des Hamiltoniens stationnaires ou dépendants du temps, consiste à chercher l'opérateur d'évolution associé [4]. Cet opérateur satisfait aussi une équation du type Schrödinger dont la résolution (formelle), quand elle est possible, se fait généralement par l'approche des transformations unitaires. Parmi les méthodes alternatives, débouchant sur des solutions exactes, il y a la méthode des invariants qui a été initiée par Lewis et Riesenfeld [4, 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. Il s'avère parfois que cette approche est plus convenable que la méthode directe reposant sur l'opérateur d'évolution.

Dans cette thèse, nous allons nous pencher sur la méthode des invariants en la décrivant en détail et en l'utilisant pour résoudre exactement l'équation de Schrödinger relative à un certain Hamiltonien dépendant du temps, associé à un problème concret de mécanique quantique.

Nous commençons, dans le chapitre 1, par un rappel succinct des éléments fondamentaux de la mécanique quantique tout en décrivant brièvement les différentes méthodes approximatives citées plus haut.

Dans le chapitre 2, nous présentons la méthode des invariants de Lewis-Riesenfeld qui nous servira dans le travail du chapitre 3. Notre façon de présenter cette méthode est par contre différente de l'approche originale de Lewis et Riesenfeld. Nous insistons surtout sur les contraintes que doit satisfaire un opérateur Hermitien pour qu'il soit un bon invariant et nous présentons d'une manière rigoureuse l'équation que doivent satisfaire les phases globales des solutions correspondantes. Nous présentons aussi d'une manière succincte la technique des transformations unitaires sur l'équation de Schrödinger et leur intérêt dans la réduction et la simplification de cette dernière.

Le chapitre 3 est consacré à la présentation détaillée de la résolution du problème d'une particule chargée, placée dans un champ électrique uniforme à une dimension et dépendant du temps. Nous utilisons la méthode décrite dans le chapitre 2 et nous construisons trois opérateurs Hermitiens en guise de trois invariants linéairement indépendants. Le premier invariant est un opérateur linéaire par rapport aux opérateurs position et impulsion de la particule. Le second est quadratique par rapport à l'opérateur impulsion et linéaire par rapport à l'opérateur position. Le troisième invariant est construit de façon qu'il soit quadratique à la fois par rapport aux opérateurs position et impulsion. Nous explicitons les conditions requises sur chacun des invariants pour que les solutions associées forment un ensemble complet et soient physiquement acceptables. Ensuite, nous développons toutes les étapes de calcul qui mènent aux solutions associées à chaque invariant. Nos résultats généralisent ceux déjà connus dans la littérature et coïncident avec eux dans des cas limites. Nous terminons ce chapitre par une discussion sur les liens entre les solutions des différents invariants.

Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion générale où nous évoquons quelques perspectives.

# Chapitre 1

## Quelques rappels sur les fondements de la mécanique quantique non relativiste

### 1.1 Brève présentation de la mécanique quantique

La mécanique quantique est venue au monde au début du XXème siècle pour mettre fin à la crise qu'a connu la physique vers la fin du XIXème. En effet, l'impuissance et l'échec de la physique classique dans la description et la compréhension des phénomènes atomiques et subatomiques, comme le rayonnement et l'aspect ondulatoire de la matière, ont incité les physiciens de l'époque à introduire de nouveaux principes basés sur l'influence de la mesure sur l'état des particules élémentaires et à élaborer une nouvelle théorie quantique capable de décrire, étudier et expliquer les phénomènes physiques qui se manifestent à l'échelle atomique et subatomique. De nos jours, elle est communément subdivisée en mécanique quantique non relativiste et mécanique quantique relativiste.

La mécanique quantique non relativiste, qui nous intéresse dans les travaux de cette thèse, est basée sur plusieurs postulats et principes dont essentiellement le principe de Heisenberg, le double aspect de la matière "onde-corpuscule" de de Broglie et l'équation de Schrödinger. Cette dernière, qu'on peut qualifier d'équation fondamentale de la physique quantique non relativiste, fut alors proposée en 1925 par Erwin Schrödinger. C'est l'équation d'évolution dans le temps d'une certaine fonction de carrée sommable, dite

fonction d'onde, qu'on doit associer à toute particule matérielle pour décrire à la fois ses aspects ondulatoire et corpusculaire. Plus de détails peuvent être trouvés dans les ouvrages élémentaires et spécialisés de la mécanique quantique tels que ceux des références [4, 3, 9].

## 1.2 Outils de base pour la description quantique d'un système physique (particule)

La théorie de la mécanique quantique donne la structure mathématique appropriée pour décrire un système physique. On associe un système quantique à un espace vectoriel complexe muni d'un produit scalaire, appelé espace de Hilbert [4]. Par exemple, l'état d'un système physique constitué d'une particule élémentaire en mouvement dans l'espace-temps est entièrement d'écrit par la donnée de la fonction d'onde

$$\psi(r; t) \in \mathcal{F}. \quad (1.1)$$

On postule que la densité de probabilité d'observer cette particule à l'instant  $t$  dans un élément de volume  $dr^3$  entourant le point  $r$  est donnée par

$$d^3P(r, t) = |\psi(r; t)|^2 d^3r, \quad (1.2)$$

cette interprétation de la fonction d'onde impose qu'elle soit de carré sommable à tout instant  $t$ . Elle est alors choisie normalisée par la condition

$$\int |\psi(r; t)|^2 d^3r = 1. \quad (1.3)$$

Par ailleurs, on postule que toute combinaison linéaire de fonctions d'onde représente un état quantique possible du système pourvu que la condition de normalisation soit satisfaite.

### 1.2.1 équation de Schrödinger dépendante du temps

L'équation d'évolution des états dynamiques d'un système quantique (particule élémentaire) représenté par la fonction d'onde  $\psi(r, t)$  a été formulée en 1925 par Erwin Schrödinger [10, 11]. Depuis, cette équation est considérée comme un postulat fondamental de la mécanique quantique non relativiste [11]. Il s'agit d'une équation du premier ordre par rapport au temps et du second ordre par rapport aux coordonnées spatiales, faisant intervenir l'opérateur Hamiltonien du système. Elle prend la forme suivante

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = H(t) \psi(r, t), \quad (1.4)$$

où  $H(t)$  est l'opérateur Hamiltonien qui est un opérateur linéaire et Hermitien, éventuellement dépendant du temps tiré de la fonction hamiltonienne classique du système considéré. Cette équation s'écrit aussi, dans la notation dite de Dirac, sous la forme

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (1.5)$$

où  $|\psi(t)\rangle$  est un vecteur abstrait, appelé état du système. La fonction d'onde  $\psi(r, t)$  représente la composante de  $|\psi(t)\rangle$  sur  $|r\rangle$ , qui s'écrit alors  $\langle r | \psi(t)\rangle$  [4]. En l'absence de champ magnétique, l'Hamiltonien d'une particule de masse  $m$  est la somme des opérateurs d'énergie cinétique et potentielle

$$H(t) = \frac{p^2}{2m(t)} + V(r, t), \quad (1.6)$$

avec  $p = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ , où  $\vec{\nabla}$  est l'opérateur gradient et  $V(r, t)$  étant l'opérateur d'énergie potentielle associée au potentiel d'interaction, éventuellement dépendant du temps.

Si le phénomène étudié est stationnaire, l'opérateur Hamiltonien correspondant ne dépend pas explicitement du temps. Dans ce cas, l'équation de Schrödinger (1.4) se réduit, après séparation des variables spatiales et du temps, à une équation aux valeurs propres stationnaire de la forme

$$H\phi(r) = E\phi(r), \quad (1.7)$$

où  $E$  désigne l'énergie du système dans l'état stationnaire  $|\phi\rangle$ , représenté par la fonction d'onde  $\phi(r)$ .

## 1.2.2 Superposition d'états

Puisque l'équation de Schrödinger est linéaire, il est évident alors que la somme de deux solutions ou plus est aussi une solution. De là découle le principe de superposition, qui est l'un des principes fondamentaux de la mécanique quantique, qui stipule qu'un système quantique pouvant exister dans des états discrets  $\psi_n(r, t)$  ( $n \in \mathbb{N}$ ), peut également

occuper l'état superposé

$$\psi(t) = \sum_n a_n \psi_n(t), \quad (1.8)$$

où les  $a_n$  sont des coefficients complexes indépendants du temps, pourvu que la condition de normalisation (1.3), qui s'écrit dans la notation de Dirac comme

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1, \quad (1.9)$$

soit satisfaite.

L'intérêt de ce principe réside dans le fait qu'un choix adéquats des coefficients  $a_n$  permet de choisir la solution physique qui satisfait les conditions aux limites requises pour le problème étudié.

## 1.2.3 Opérateur d'évolution

Puisque l'équation de Schrödinger est du premier ordre par rapport au temps, il est alors toujours possible de relier l'état du système,  $|\psi(t)\rangle$ , à l'instant  $t$  quelconque, à son état à  $|\psi(t_0)\rangle$ , un instant antérieur  $t_0$ , par l'intermédiaire d'un opérateur  $U(t, t_0)$ , vérifiant  $U(t_0, t_0) = I$ , sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (1.10)$$

L'opérateur  $U(t, t_0)$ , appelé opérateur d'évolution, est une fonctionnelle sur  $H(t)$  et

est unitaire, c'est-à-dire satisfaisant à la relation

$$U^+(t, t_0)U(t, t_0) = U(t, t_0)U^+(t, t_0) = I, \quad (1.11)$$

où  $I$  est l'opérateur identité.

La définition(1.10) permet de montrer que l'équation de Schrödinger est également satisfaite par l'opérateur d'évolution

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H(t)U(t, t_0). \quad (1.12)$$

Le calcul exact de l'opérateur  $U(t, t_0)$  dans le cas où l'Hamiltonien dépend du temps est en général compliqué, voire même impossible, hormis dans quelques cas simples mais exemplaires et par conséquent on recourt le plus souvent aux méthodes de perturbation. En revanche, si  $H$  est indépendant du temps, on obtient la solution formelle de (1.12) sous la forme

$$U(t, t_0) = e^{\frac{1}{i\hbar}H(t-t_0)}. \quad (1.13)$$

#### 1.2.4 Incertitudes. Mesure d'un état quantique

Chaque grandeur physique mesurable  $A$  est dite observable. Il lui est associée un opérateur linéaire Hermitien  $\hat{A}$ , agissant sur l'espace de Hilbert [12]. Les résultats possibles de la mesure de  $A$  sont les valeurs propres de l'opérateur (observable). La probabilité de trouver la valeur lors d'une mesure de  $A$ , effectuée sur un système dans l'état quelconque  $|\psi(t)\rangle$  est alors [4]

$$P(\alpha) = |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2, \quad (1.14)$$

où  $\langle \alpha |$  est le vecteur propre de  $\hat{A}$ , associé à la valeur propre  $\alpha$ .

En fait, il existe des observables qui ne peuvent pas être mesurées simultanément avec précision. Dans ce cas, les opérateurs associés ne commutent pas. En réalité, la mesure d'une observable modifie l'état du système. C'est le cas par exemple de la position et de l'impulsion d'une particule. Plus on augmente la précision sur la mesure de l'une d'elles, plus on perturbe la valeur de l'autre. Plus précisément, si on définit les incertitudes sur

les mesures de la coordonnée  $x$  et l'impulsion correspondante  $p_x$  d'une particule quantique par les écart-types  $\Delta x$  et  $\Delta p_x$ , elles devront satisfaire l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.15)$$

et de même pour les composante sur les axes  $y$  et  $z$ . Quantitativement les sont généralement identifiés avec les écarts-types, (écarts quadratiques), définis par

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad (1.16)$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}, \quad (1.17)$$

où  $\langle \rangle$  désigne la valeur moyenne dans un état du système. Par exemple, dans l'état  $|\psi(t)\rangle$ , supposé normalisé, d'un système évoluant à une dimension, les valeurs moyennes des puissances de  $x$  et  $p$ , se calculent par

$$\langle x^l \rangle = \int \psi^*(x, t) x^l \psi(x, t) dx, \quad (1.18)$$

et

$$\langle p^l \rangle = \int \psi^*(x, t) \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^l \psi(x, t) dx. \quad (1.19)$$

### 1.3 Méthodes approximatives pour la résolution de l'équation de Schrödinger avec Hamiltonien dépendant explicitement du temps

En mécanique quantique, comme c'est le cas dans d'autres branches de la physique, les méthodes d'approximation jouent un rôle fondamental dans la résolution approchée des problèmes qui ne sont pas exactement solubles. En fait, il existe plusieurs méthodes d'approximation. Dans cette partie, nous allons en présenter brièvement quelques unes, utilisées dans la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

### 1.3.1 Théorie des perturbations dépendants du temps

En réalité, la plupart des problèmes de la mécanique quantique n'ont pas de solution analytique, seuls quelques uns, qu'on qualifie de problèmes idéalisés, possèdent des solutions exactes de l'équation de Schrödinger [1, 4]. La théorie des perturbations dépendantes du temps est parfois un outil très puissant pour approcher, sous certaines conditions, les solutions des problèmes qui ne sont pas exactement solubles. Dans cette théorie, l'Hamiltonien du système physique est subdivisé en deux parties, une partie fondamentale, généralement indépendante du temps et dont on connaît la solution exacte, et une autre partie, considérée comme une petite perturbation. Ainsi,

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (1.20)$$

où  $H_0$  dénote l'hamiltonien du système idéal non-perturbé, dont les vecteurs et valeurs propres sont respectivement notés  $|E_n\rangle$  et  $E_n$ , tandis que  $V(t)$  représente une petite perturbation qui dépend du temps. Le terme  $V(t)$  est un terme d'interaction dont les éléments de matrice non diagonaux dans la base des états propres de  $H_0$ ,  $V_{nm} = \langle E_n | V | E_m \rangle$  sont supposés petits devant les écarts énergétiques  $E_{nm} = |E_n - E_m|$ , i.e.  $|V_{nm}(t)| \ll |E_n - E_m|$ .

En général, il est toujours possible de représenter l'état perturbé  $|\psi(t)\rangle$  comme une combinaison linéaire sur les états propres de  $H_0$ , sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \gamma_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |E_n\rangle. \quad (1.21)$$

Les fonctions du temps  $\gamma_k(t)$  satisfont donc le système d'équations différentielles suivant

$$i\hbar\dot{\gamma}_k(t) = \sum_n V_{kn}(t) e^{\frac{i}{\hbar}(E_k - E_n)t} \gamma_n(t). \quad (1.22)$$

Cette méthode permet de calculer approximativement (jusqu'à un certain ordre par rapport aux  $V_{nm}(t)$ ) les fonctions d'onde à partir des états stationnaires du système non perturbé.

### 1.3.2 Approximation adiabatique

Lorsque l'Hamiltonien d'un système quantique dépend du temps à travers un ensemble de paramètres  $\{X_i(t)\}$ , regroupés dans le vecteur  $X(t)$ , et lorsque ces derniers évoluent très lentement dans le temps, on dit que le système est dans la limite adiabatique. On admet alors que le système quantique dans cette situation a toujours le temps de s'adapter aux changements de son environnement de sorte qu'il passe par une succession d'états d'équilibres instantanés. Les solutions de l'équation de Schrödinger à un instant donné peuvent alors être approchées au moyen des fonctions propres de l'Hamiltonien instantané [2, 3]. En d'autres termes, une fonction propre particulière à un instant donné évolue de manière continue vers la fonction propre correspondante à un instant ultérieur.

Soit  $H(X(t))$  un Hamiltonien qui dépend de l'ensemble de paramètres  $\{X_i(t)\}$ . Supposons que ces paramètres dépendent adiabatiquement du temps  $t$ . Les états propres de  $H(X(t))$  sont les solutions de l'équation aux valeurs propres et par conséquent ils ne sont états propres qu'en un temps  $t$  donné. Autrement dit, les états propres instantanés et les énergies propres correspondantes doivent être définis pour chaque valeur de  $t$  à travers la solution de l'équation

$$H(X(t)) |n, X(t)\rangle = E_n(X(t)) |n, X(t)\rangle, \quad (1.23)$$

en considérant le temps  $t$  comme un paramètre.

Ainsi,  $E_n(X(t))$  et  $|n, X(t)\rangle$  forment respectivement un ensemble d'énergies propres instantanées et une base d'états propres instantanés pour  $H(X(t))$ , qui peuvent être ajustés pour satisfaire aux relations d'orthonormalisation et de fermeture

$$\langle n, X(t) | m, X(t) \rangle = \delta_{nm}, \quad (1.24a)$$

$$\sum_n |n, X(t)\rangle \langle n, X(t)| = 1. \quad (1.24b)$$

La formulation usuelle du théorème adiabatique exprime que si le système est préparé à l'instant initial  $t = 0$  dans un état propre de  $H(X(t))$ , i.e.  $|\psi_n(0)\rangle = |n, \{X(0)\}\rangle$ , il évolue vers un état  $|\psi_n(t)\rangle$  qui, à tout instant, reste état propre de l'Hamiltonien  $H(X(t))$ . On peut alors écrire

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp i\phi_n(t) |n, X(t)\rangle, \quad (1.25)$$

où la phase  $\phi_n(t)$  est tel que  $|\psi_n(t)\rangle$  satisfait l'équation de Schrödinger. Donc, si on impose à  $|\psi_n(t)\rangle$  de satisfaire l'équation de Schrödinger (1.4) et on projette l'équation obtenue sur l'état propre  $|\psi_n(t)\rangle$  lui-même, on obtient

$$\langle\psi_n(t)| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = \langle\psi_n(t)| H(X(t)) |\psi_n(t)\rangle. \quad (1.26)$$

On montre plus précisément que cette phase  $\phi_n(t)$  est la somme de la phase dynamique [13].

$$\phi_n^d(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t) dt, \quad (1.27)$$

et de la phase géométrique

$$\phi_n^g(t) = i \int_{X_i(0)}^{X_i(t)} \langle n, X(t) | \nabla_X | n, X(t) \rangle dX. \quad (1.28)$$

L'écriture (1.28) montre la nature géométrique de la phase  $\phi_n^g(t)$ ; elle dépend explicitement du chemin parcouru dans l'espace des paramètres [13]. Dans le cas où le chemin parcouru est une courbe  $C$  fermée dans l'espace des paramètres  $\{X_i(t)\}$ , la phase géométrique est appelée phase de Berry, découverte pour la première fois en 1983 [14]. Elle s'écrit dans ce cas comme

$$\phi_n^g(t) = i \oint \langle n, X(t) | \nabla_X | n, X(t) \rangle dX. \quad (1.29)$$

Physiquement, la phase de Berry est reliée à de nombreux phénomènes purement quantiques. Elle se manifeste dans l'étude de systèmes en évolution adiabatique dont l'Hamiltonien dépend explicitement d'un certain nombre de paramètres classiques.

## 1.4 Méthodes exactes pour la résolution de l'équation de Schrödinger avec Hamiltonien dépendant explicitement du temps

### 1.4.1 opérateur d'évolution

Comme nous l'avons déjà évoqué, la méthode standard pour obtenir des solutions exactes de l'équation de Schrödinger repose essentiellement sur l'obtention de l'opérateur d'évolution, satisfaisant à l'équation (1.12). Lorsque l'Hamiltonien dépend explicitement du temps, cette équation peut être intégrée formellement entre  $t_0$  et  $t$  et mise sous la forme

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) U(t_1, t_0). \quad (1.30)$$

En itérant cette relation une fois, on peut écrire

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) U(t_1, t_0) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) U(t_2, t_0), \quad (1.31)$$

et si l'itération est répétée un nombre infini de fois, on aboutit à l'écriture

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n). \quad (1.32)$$

En introduisant l'opérateur de produit chronologique  $T$ , défini par

$$T[H(t_1) \dots H(t_n)] = H(t_{p_1}) \dots H(t_{p_n}) \text{ si } t_{p_1} \succ t_{p_2} \succ \dots t_{p_n}, \quad (1.33)$$

où  $p$  est une permutation quelconque de  $1, \dots, n$ . l'expression de  $U(t, t_0)$  se ramène à

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T [H(t_1) \dots H(t_n)], \quad (1.34)$$

qu'on écrit formellement sous la forme

$$U(t, t_0) = T \exp \left( \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right). \quad (1.35)$$

En fait, si dans le cas particulièrement simple où l'Hamiltonien  $H$  ne dépend pas du temps, l'opérateur  $U(t, t_0)$  se ramène à la forme (1.13).

Le problème est que (1.34) n'est qu'une écriture formelle de l'opérateur d'évolution et ne constitue guère une solution de l'équation (1.12) si l'Hamiltonien est explicitement dépendant du temps d'une manière générale. Cependant, dans le cas particulier où l'Hamiltonien prend la forme

$$H(t) = \sum_{i=1}^M g_i(t) K_i, \quad (1.36)$$

où les  $K_i$  sont les générateurs d'une certaine algèbre de Lie de dimension  $N \succeq M$ , on a

$$\int_{t_0}^t H(\acute{t}) d\acute{t} = \sum_{i=1}^M \bar{g}_i(t, t_0) K_i \text{ avec } \bar{g}_i(t, t_0) = \int_{t_0}^t g_i(\acute{t}) d\acute{t}. \quad (1.37)$$

Dans ce cas, on montre que  $U(t, t_0)$  peut être exprimé sous la forme [15]

$$U(t, t_0) = \prod_{i=1}^N \exp(h_i(t, t_0) K_i), \quad (1.38)$$

où les  $h_i(t, t_0)$  sont des fonctionnelles sur les  $\bar{g}_i(t, t_0)$  et satisfont des équations non linéaires couplées.

Dans le cas des algèbres de Lie de dimensions réduites, les équations non linéaires couplées sont en général séparables et intégrables.

### 1.4.2 La méthode des invariants

La méthode des invariants représente une alternative pour la résolution exacte de l'équation de Schrödinger lorsque l'Hamiltonien est explicitement dépendant du temps et s'écrit comme une combinaison linéaire des générateurs d'une certaine algèbre (1.36). Elle a été proposée pour la première fois par Lewis et Riesenfeld dans la résolution des problèmes de l'oscillateur harmonique à fréquence dépendante du temps et celui d'une particule dans un champ électromagnétique dépendant du temps [7, 16]. Brièvement, cette méthode consiste à transformer le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps en la résolution d'une équation aux valeurs propres. Nous revenons sur une description détaillée de cette méthode dans le chapitre 2.

### 1.4.3 Les transformations unitaires

Les transformations unitaires en mécanique quantique sont incontournables dans la résolution de l'équation de Schrödinger si l'Hamiltonien est non stationnaires. En effet, elles sont nécessaires que ce soit dans la méthode standard, basée sur le calcul de l'opérateur d'évolution, ou dans la méthode alternative, basée sur les invariants. Le but d'utiliser une transformation unitaire ou plusieurs transformations unitaires est de réduire l'équation de Schrödinger originale en une équation équivalente qui est souvent plus simple à résoudre. Plus de détails sur l'utilisation de cette technique seront donnés à la fin du chapitre 2.

# Chapitre 2

## Méthode des invariants et transformations unitaires pour la résolution de problèmes non stationnaires

### 2.1 Introduction

Depuis l'introduction de l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste par Schrödinger, on n'a pas cessé d'essayer de lui trouver des méthodes de résolution adéquates. De nos jours, il existe une variété de techniques dont chacune peut être mieux adaptée à une situation particulière.

Lorsque l'Hamiltonien quantique d'un système physique dépend explicitement du temps, en général il ne peut pas représenter une constante du mouvement. En effet, si la dépendance temporelle de l'Hamiltonien ne permet pas de traiter l'équation de Schrödinger par la technique de séparation des variables d'espace et du temps, cette dernière ne peut pas être ramenée à une équation aux valeurs propres, comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 1. Par ailleurs, on ne peut pas parler d'états d'énergies constantes car le système est continuellement en évolution. Cependant, l'existence d'observables dites constantes du mouvement, autrement dit dont les opérateurs associés sont invariants dans

le temps, peut aider à comprendre mieux l'évolution du système. Pour la première fois en 1969, Lewis et Riesenfeld [7] avaient présenté une nouvelle théorie faisant le lien entre les états propres d'un opérateur invariant et les solutions de l'équation de Schrödinger pour l'Hamiltonien du problème concerné. Ils ont appliqué cette théorie avec succès à la résolution de l'équation de Schrödinger pour deux problèmes dont les Hamiltoniens dépendent explicitement du temps. Le 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.

En général, 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 Heisenberg ou celle de Lie par exemple. Son avantage 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. Il s'avère qu'il existe une relation biunivoque entre les états propres de l'invariant et les solutions de l'équation de Schrödinger associée.

En fait, la technique largement connue et utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps consiste à chercher l'opérateur d'évolution via des transformations unitaires adéquates [8]. Partant de l'équation de Schrödinger dépendante du temps ou de façon équivalente de l'équation similaire de l'opérateur d'évolution, dont la solution n'est pas évidente, on procède par des transformations unitaires successives sur la fonction d'onde (l'opérateur d'évolution), jusqu'à ce qu'on obtienne une nouvelle équation, du type Schrödinger aussi, plus maniable. Une fois cette dernière équation est résolue, la solution de l'équation de départ sera alors retrouvée par application des transformations unitaires inverses.

Il faut noter que si un problème est exactement soluble par une méthode, il le sera aussi par l'autre. Ainsi, il n'existe à priori aucune recette qui indique la meilleure des deux approches du point de vue de la simplicité, mais tout dépend du problème étudié.

Dans certains cas, les transformations unitaires sont appliquées conjointement avec la méthode des invariants. Tout d'abord, on procède par des transformations unitaires appropriées afin de réduire l'équation de Schrödinger originale en une équation équivalente,

impliquant un Hamiltonien plus simple, s'écrivant par exemple comme une combinaison linéaire des générateurs d'une algèbre de dimension réduite. Ensuite, on procède par la méthode des invariants afin de résoudre cette dernière équation et finir par retrouver les solutions de l'équation de départ en procédant par les transformations unitaires inverses.

Dans les sections suivantes de ce chapitre, nous allons présenter plus ou moins en détails l'essentiel de ces deux techniques.

## 2.2 Méthode des invariants

### 2.2.1 Exposé de la méthode

Dans cette section, nous allons exposer en détail la méthode des invariants en suivant une approche différente de celle présentée originellement par Lewis et Riesenfeld, tout en insistant sur les conditions de validité de la méthode.

Soit  $I(t)$  un opérateur hermitien

$$I(t) = I^\dagger(t), \quad (2.1)$$

dépendant explicitement du temps, en plus de sa dépendance par rapport aux observables d'un système physique caractérisé par l'Hamiltonien  $H(t)$ , dépendant explicitement du temps aussi.

On dit que  $I(t)$  est un opérateur invariant, ou constante du mouvement, s'il satisfait l'équation d'invariance

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H] = 0, \quad (2.2)$$

Dans le cadre non relativiste, le vecteur d'état du système  $|\psi(t)\rangle$ , décrivant son évolution au cours du temps, satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t) |\psi(t)\rangle. \quad (2.3)$$

En faisant agir  $I(t)$  sur les deux membres de l'équation (2.3) et utilisant l'équation (2.2), on en déduit aisément la nouvelle équation suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I(t) |\psi(t)\rangle) = H(t) (I(t) |\psi(t)\rangle). \quad (2.4)$$

Cette dernière équation signifie que le nouveau vecteur  $|\dot{\psi}(t)\rangle = I(t) |\psi(t)\rangle$  satisfait aussi l'équation de Schrödinger (2.3) et par conséquent il est aussi vecteur d'état du système en question. Ce résultat est bien sûr valable quel que soit l'opérateur invariant  $I(t)$ .

### 2.2.2 Propriété des valeurs propres d'un invariant

On suppose que l'invariant  $I(t)$  est un opérateur d'un ensemble complet d'opérateurs qui commutent (ECOC) [4] et donc il possède un ensemble complet des états propres. On dénote les valeurs propres de  $I(t)$  par  $\lambda$ , et les états propres orthonormés associés à  $\lambda$  par  $|\lambda, k; t\rangle$ , où  $k$  signifie tous les autres nombres quantiques de l'ECOC.

L'équation aux valeurs propres de  $I(t)$  s'écrit

$$I(t) |\lambda, k; t\rangle = \lambda |\lambda, k; t\rangle, \quad (2.5)$$

avec

$$\langle \dot{\lambda}, \dot{k}; t | \lambda, k; t \rangle = \delta_{\dot{\lambda}\lambda} \delta_{\dot{k}k}, \quad (2.6)$$

et

$$\sum_{\lambda k} |\lambda, k; t\rangle \langle \lambda, k; t| = I. \quad (2.7)$$

Nous avons considéré ici que les nombres quantiques et  $k$  sont discrets pour alléger les calculs qui vont suivre mais toutefois le raisonnement demeure valable même si ces nombres quantiques sont continus.

Dans la suite, on admettra que pour chaque valeur propre, le sous espace de Hilbert engendré par les vecteurs propres  $|\lambda, k; t\rangle$  demeure invariant par l'action de l'opérateur  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)$ . Ainsi, quel que soit le vecteur propre  $|\lambda, k; t\rangle$ , on a

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right) |\lambda, k; t\rangle = \sum_{\dot{k}} f(\lambda, \dot{k}, t) |\lambda, k; t\rangle, \quad (2.8)$$

où  $f(\lambda, \dot{k}; t)$  les sont des fonctions bornées.

On admettra aussi que  $I(t)$  ne dépend pas de l'opérateur différentiel  $\frac{\partial}{\partial t}$  de telle sorte que les vecteurs propres  $|\lambda, k; t\rangle$  sont définis à une phase près. Autrement dit, les nouveaux vecteurs définis par

$$|\lambda, k; t\rangle_{\alpha} = e^{i\alpha_{\lambda k}(t)} |\lambda, k; t\rangle, \quad (2.9)$$

où les  $\alpha_{\lambda k}(t)$  sont des fonctions du temps réelles et arbitraires, satisfont aussi l'équation aux valeurs propres (2.5). Cette propriété s'avèrera très importante dans la suite comme nous allons le voir.

Nous allons montrer que, tenant compte de la condition (2.8), les valeurs propres de l'opérateur invariant  $I(t)$  sont des constantes indépendantes du temps. En effet, en supposant que, dans (2.5), est une fonction du temps et dérivant les deux membres de cette relation par rapport à ce dernier, on obtient

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + I(t) \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle. \quad (2.10)$$

Par ailleurs, en faisant agir (2.2) à gauche sur le vecteur  $|\lambda, k; t\rangle$  et utilisant (2.5), il vient que

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle + I(t) H(t) |\lambda, k; t\rangle - \lambda H(t) |\lambda, k; t\rangle = 0. \quad (2.11)$$

En combinant (2.10) et (2.11), on obtient

$$I(t) \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right) |\lambda, k; t\rangle = \lambda \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)\right) |\lambda, k; t\rangle + \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\lambda, k; t\rangle = 0. \quad (2.12)$$

En multipliant les deux membres de (2.12) scalairement par le bras  $\langle \lambda, k ; t |$  et tenant compte de (2.8), on aura

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = 0. \quad (2.13)$$

Ce qui signifie que les valeurs propres de l'invariant ne dépendent pas du temps bien que les états propres correspondants en dépendent. Cette propriété est bien sur subordonnée à la contrainte(2.8), traduisant le fait que  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)$  laisse invariant l'espace de Hilbert engendré par les états propres de l'opérateur invariant.

Remarquons que si c'est la relation (2.13) qui est supposée satisfaite par toutes les valeurs propres, la relation (2.8) deviendrait une conséquence.

### 2.2.3 Relation entre les vecteurs propres d'un opérateur invariant et les solutions de l'équation de Schrödinger

Notre but est bien sur de trouver la relation entre des solutions de l'équation de Schrödinger et les états propres d'un opérateur invariant. Pour ce faire, nous allons présenter ici une nouvelle approche différente de celle qu'on trouve dans la littérature et précisément dans l'article original de Lewis et Riesenfeld [7].

Remarquons tout d'abord qu'en se servant du résultat (2.13), la relation (2.10) peut être réduite en

$$(\lambda - I(t)) \frac{\partial}{\partial t} |\lambda, k ; t\rangle = \frac{\partial I(t)}{\partial t} |\lambda, k ; t\rangle, \quad (2.14)$$

qu'on peut écrire, compte tenu de (2.11), sous la forme

$$(\lambda - I(t)) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) |\lambda, k ; t\rangle = 0. \quad (2.15)$$

En multipliant (2.15) scalairement par le bras  $\langle \lambda, k ; t |$  et prenant en considération la condition (2.8), on obtient

$$(\lambda - \lambda) \langle \lambda, k ; t | \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) |\lambda, k ; t\rangle = 0. \quad (2.16)$$

La relation (2.16) est satisfaite pour  $k, \acute{k}, \lambda$  et  $\grave{\lambda}$  arbitraires. Pour  $\lambda \neq \grave{\lambda}, k$  et  $\acute{k}$  arbitraires, on peut écrire

$$\langle \grave{\lambda}, \acute{k}; t | \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \lambda, k; t \rangle = 0. \quad (2.17)$$

Cette dernière équation signifie que le vecteur  $(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)) | \lambda, k; t \rangle$  est orthogonal à tous les vecteurs propres dont la valeur propre est différente de  $\lambda$  ce qui est justement le cas car on a admis qu'il se développe sur le sous espace de Hilbert correspondant à la valeur propre  $\lambda$  relation (2.8). Par ailleurs, puisque l'équation (2.17) n'est pas forcément satisfaite pour  $\lambda = \grave{\lambda}$ , on ne peut pas en déduire immédiatement que  $| \lambda, k; t \rangle$  est une solution de l'équation de Schrödinger. Pour surmonter cette difficulté, ajoutons des phases arbitraires aux vecteurs propres  $| \lambda, k; t \rangle$ . Autrement dit, considérons les vecteurs propres  $| \lambda, k; t \rangle_{\alpha}$  définis par (2.9) et remarquons que la condition (2.8) demeure valide pour ces nouveaux vecteurs. L'équation (2.17) peut alors être écrite d'une manière équivalente comme

$${}_{\alpha} \langle \grave{\lambda}, \acute{k}; t | \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \lambda, k; t \rangle_{\alpha} = 0, \quad (2.18)$$

qui est valable quelle que soit la phase  $\alpha_{\lambda k}(t)$ .

Multiplions tensoriellement les deux membres de (2.18) à gauche par  $| \grave{\lambda}, \acute{k}; t \rangle_{\alpha} = e^{i\alpha_{\lambda k}(t)} | \lambda, k; t \rangle$  et sommons sur toutes les valeurs de  $\acute{k}$  et  $\grave{\lambda}$  à l'exception de la valeur  $\lambda = \grave{\lambda}$  Sachant que

$$\sum_{\substack{\lambda \neq \grave{\lambda} \\ \acute{k}}} | \grave{\lambda}, \acute{k}; t \rangle_{\alpha\alpha} \langle \grave{\lambda}, \acute{k}; t | = 1 - \sum_{\acute{k}} | \lambda, \acute{k}; t \rangle_{\alpha\alpha} \langle \lambda, \acute{k}; t |, \quad (2.19)$$

on obtient

$$\begin{aligned} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \lambda, k; t \rangle_{\alpha} &= e^{i\alpha_{\lambda k}(t)} \sum_{\acute{k}} | \lambda, \acute{k}; t \rangle_{\alpha\alpha} \langle \lambda, \acute{k}; t | \times \\ &\quad \left( \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) - \hbar \dot{\alpha}_{\lambda k}(t) \right) | \lambda, k; t \rangle. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Ainsi, si le membre de droite (2.20) de s'annule identiquement, les vecteurs propres  $|\lambda, k; t\rangle_\alpha$  satisfont l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\lambda, k; t\rangle_\alpha}{\partial t} = H(t) |\lambda, k; t\rangle_\alpha. \quad (2.21)$$

Cette condition se réalise si le vecteur  $((i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)) - \hbar \dot{\alpha}_{\lambda k}(t)) |\lambda, k; t\rangle$  est orthogonal à tous les vecteurs propres  $|\lambda, \acute{k}; t\rangle$  avec  $\acute{k}$  arbitraire. En tenant compte de (2.8), ceci veut dire que ce vecteur est nul. Par conséquent, les vecteurs  $|\lambda, k; t\rangle_\alpha$  satisfont l'équation de Schrödinger (2.21) si et seulement si les vecteurs  $|\lambda, k; t\rangle$  et les phases  $\alpha_{\lambda k}(t)$  sont tels que

$$\hbar \dot{\alpha}_{k\lambda}(t) |\lambda, k; t\rangle = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) |\lambda, k; t\rangle. \quad (2.22)$$

Si la valeur propre n'est pas dégénérée, (2.22) est automatiquement satisfaite. Pour les valeurs propres dégénérées, la relation (2.22) n'est pas toujours satisfaite. Dans pareils cas, il faut construire les vecteurs propres  $|\lambda, k, t\rangle$  de telle sorte qu'ils diagonalisent l'opérateur Hermitien  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)$ , ce qui est toujours possible car l'équation de l'invariant (2.2) signifie aussi que  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t)$  commute avec  $I(t)$ .

Enfin, signalons que l'équation (2.22) que nous obtenons de façon rigoureuse est une équation vectorielle et par conséquent elle est plus restrictive que celle donnée par Lewis et Riesenfeld.

En résumé, la théorie de Lewis-Riesenfeld consiste à chercher des opérateurs invariants Hermitiens dont les valeurs propres sont indépendantes du temps.

## 2.2.4 Solution générale de l'équation de Schrödinger

Nous avons montré que les états propres d'un invariant, satisfaisant à certaines conditions, affectées d'un facteur de phase approprié forment un ensemble complet de solutions pour l'équation de Schrödinger. D'après le principe de superposition, toute combinaison linéaire de solutions de l'équation de Schrödinger est aussi solution de l'équation.

Ainsi, une solution générale de l'équation de Schrödinger, éventuellement sous forme d'un paquet d'onde, basée sur les états propres de l'invariant  $I(t)$ , peut être écrite sous la forme

$$|\psi_\varsigma(t)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k}^\varsigma |\lambda, k; t\rangle_\alpha, \quad (2.23)$$

où les coefficients  $C_{\lambda k}^\varsigma$  sont des paramètres complexes indépendants du temps et  $\varsigma$  étant éventuellement un paramètre quantique caractérisant les états  $|\psi_\varsigma(t)\rangle$ . Ils peuvent être fixés en fonction des composantes de l'état initial  $|\psi_\varsigma(0)\rangle$  sur les vecteurs propres initiaux de l'opérateur invariant,  $|\lambda, k; t_0\rangle_\alpha$  : En effet, puisque (2.23) devrait être satisfaite à tout instant, en particulier à l'instant initial  $t_0$ , on peut écrire alors

$$|\psi_\varsigma(t_0)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k}^\varsigma |\lambda, k; t_0\rangle_\alpha, \quad (2.24)$$

et en multipliant scalairement les deux membres de (2.24) par  $\langle \hat{\lambda}, \hat{k}; t_0 |$  et utilisant la propriété d'orthonormalisation (2.6), on obtient

$$C_{\lambda k}^\varsigma =_\alpha \langle \hat{\lambda}, \hat{k}; t_0 | \psi_\varsigma(t_0) \rangle = \exp(-i\alpha_{\lambda k}(t_0)) \langle \hat{\lambda}, \hat{k}; t_0 | \psi_\varsigma(t_0) \rangle. \quad (2.25)$$

## 2.2.5 Construction d'opérateurs invariants

Après avoir compris l'intérêt des opérateurs invariants dans la résolution de l'équation de Schrödinger, on se demande s'il existe une recette spéciale pour construire des opérateurs invariants, satisfaisant aux conditions citées dans la section 2.2.3. En principe, si l'opérateur d'évolution de l'équation de Schrödinger, est connu, il est alors possible de construire autant d'opérateurs que nous voulons, satisfaisant à l'équation (2.2). En effet, si  $U_e(t)$  dénote l'opérateur d'évolution de l'équation (2.2), il satisfait une équation du type Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial U_e(t)}{\partial t} = H(t) U_e(t), \quad (2.26)$$

et par conséquent, tout opérateur  $I(t)$ , défini par

$$I(t) = U_e(t) I_0 U_e^+(t), \quad (2.27)$$

satisfait l'équation (2.2), où  $I_0 = I(0)$  est à priori un opérateur Hermitien arbitraire. Cependant, pour construire des opérateurs invariants selon (2.27), il faut en principe

connaître  $U_e(t)$ , ce qui nécessite la résolution de l'équation du type Schrödinger (2.26) et c'est justement ce que nous voulons éviter en adoptant la méthode de Lewis-Riesenfeld. Néanmoins, dans certaines situations particulières, on peut exploiter le résultat (2.27) pour construire des opérateurs invariants sans pour autant connaître  $U_e(t)$  : Nous allons donner l'exemple où l'Hamiltonien s'écrit comme une combinaison linéaire des générateurs  $O_i$  d'une certaine algèbre fermée  $\Xi$  (des opérateurs hermitiens) ; de dimension  $M$  [17].

$$\Xi = \{O_0, O_1, O_2, \dots, O_M\}, \quad (2.28)$$

satisfaisant à

$$[O_i, O_j] = \sum_{k=0}^M \varepsilon_{ijk} O_k, \quad (2.29)$$

où  $O_0$  désigne, à priori, l'opérateur identité.

En effet, si l'Hamiltonien  $H(t)$  s'écrit comme une combinaison linéaire sur les générateurs  $O_i$  ;

$$H(t) = \sum_{i=0}^N h_i(t) O_i, \text{ avec } N \leq M \quad (2.30)$$

où les  $h_i(t)$  sont des fonctions réelles dépendantes éventuellement du temps, alors, l'opérateur d'évolution peut se mettre sous la forme [15]

$$U(t) = \prod_{i=0}^N \exp \frac{i}{\hbar} l_i(t) O_i, \quad (2.31)$$

où les  $l_i(t)$  sont des fonctions des  $h_i(t)$  : Ainsi, en choisissant l'opérateur Hermitien  $I_0$  sous la forme

$$I_0 = \sum_{i=0}^M \gamma_i O_i, \quad (2.32)$$

où les coefficients  $\gamma_i$  sont des paramètres réels à priori arbitraires, et compte tenu de (2.27) et de (2.29), l'opérateur invariant s'écrira sous la forme

$$I(t) = \sum_{j=0}^M \alpha_j(t) O_j, \quad (2.33)$$

où les  $\alpha_i(t)$  sont des fonctions réelles du temps à déterminer.

En insérant (2.30) et (2.33) dans l'équation (2.2), et compte tenu de (2.29), on voit qu'il suffit de choisir les coefficients  $\alpha_i(t)$  vérifiant le système d'équations couplées suivant

$$i\hbar\dot{\alpha}_k(t) = \sum_{j=0}^M g_{kj}\alpha_j, \quad (2.34)$$

avec

$$g_{jk} = \sum_{i=0}^M h_i(t) \varepsilon_{ijk}. \quad (2.35)$$

Par conséquent, connaissant la solution du système d'équation (2.34), on obtient l'invariant  $I(t)$  : Notons que l'invariant ainsi construit dépend des coefficients initiaux  $\gamma_i$ , c'est-à-dire du choix de l'invariant initial  $I_0 = I(0)$

Avant de clore cette section, notons que tout invariant de la forme (2.33) satisfait les contraintes citées dans la section 2.2.3 car  $I(t)$ ,  $H(t)$  et  $\frac{\partial I}{\partial t}$  sont des opérateurs engendrés par les générateur d'une même algèbre. Ainsi, en principe, il n'y a aucune restriction sur le choix de l'invariant initial, pourvu qu'il soit sous la forme (2.32). Cependant, le but final est d'obtenir un opérateur invariant  $I(t)$  dont l'équation aux valeurs propres peut être résolue exactement et par conséquent le choix de  $I_0$  doit quand même être judicieux.

## 2.3 Relation entre les fonctions propres d'un invariant et le propagateur de Feynman

Dans la formulation intégrale de chemin, le propagateur de Feynman  $K(r, t, r_0, t_0)$  qui fait évoluer la fonction d'onde, solution de l'équation de Schrödinger, du point  $(r_0, t_0)$  au point  $(r, t)$  est défini par [16]

$$\psi(r, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dr_0 K(r, t, r_0, t_0) \psi(r_0, t_0). \quad (2.36)$$

En dénotant par  $\phi_{\lambda k}(r, t) = \langle r | |\lambda, k, t\rangle$ , l'équation (2.23) peut être écrite en représentation  $|r\rangle$  sous la forme

$$\psi(r, t) = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k} \exp(i\alpha_{\lambda k}(t)) \phi_{\lambda k}(r, t), \quad (2.37)$$

où l'on fait abstraction du paramètre  $\varsigma$ .

Par ailleurs, à partir de la définition (2.25), en utilisant la relation de fermeture  $\int dr_0 |r_0\rangle \langle r_0| = 1$ , on obtient

$$C_{\lambda k} = \exp(-i\alpha_{\lambda k}(t_0)) \int dr_0 \phi_{\lambda k}^*(r_0, t_0) \psi(r_0, t_0). \quad (2.38)$$

En insérant (2.38) dans (2.37), on obtient

$$\psi(r, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dr_0 \sum_{\lambda k} \exp(i\alpha_{\lambda k}(t) - i\alpha_{\lambda k}(t_0)) \phi_{\lambda k}^*(r_0, t_0) \phi_{\lambda k}(r, t) \psi(r_0, t_0). \quad (2.39)$$

En comparant (2.39) avec (2.36), on voit qu'on peut exprimer le propagateur de Feynman en terme des fonctions propres de l'invariant et de leurs phases correspondantes comme

$$K(r, t, x_0, t_0) = \sum_{\lambda k} \exp[i(\alpha_{\lambda k}(t) - \alpha_{\lambda k}(t_0))] \phi_{\lambda k}^*(x_0, t_0) \phi_{\lambda k}(r, t). \quad (2.40)$$

On retrouve ainsi l'écriture formelle du propagateur de Feynmann en fonction d'un ensemble complet de solutions de l'équation de Schrödinger correspondante.

## 2.4 Transformations unitaires et résolution de l'équation de Schrödinger

Il est bien connu que les propriétés de symétrie jouent un rôle central dans la résolution de nombreux problèmes en physique et particulièrement en mécanique quantique. Ainsi, on dit en physique qu'un système présente une symétrie ou une invariance s'il peut être décrit de différentes manières mais qui aboutissent à des prévisions équivalentes sur son

évolution.

En mécanique quantique, tout système physique est décrit par des états quantiques formant un espace de Hilbert. On dit que le système quantique possède une symétrie s'il s'avère possible de trouver une transformation qui change les états quantiques sans pour autant modifier les prévisions sur les observables de la théorie.

Soit  $H(t)$  l'Hamiltonien d'un système quantique [8] dont l'évolution temporelle du vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  est régie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle, \quad (2.41)$$

et soit  $U(t)$  un opérateur linéaire, inversible, qui relie  $|\psi(t)\rangle$  à un autre vecteur  $\overline{|\psi(t)\rangle}$  par

$$|\psi(t)\rangle = U(t) \overline{|\psi(t)\rangle}. \quad (2.42)$$

Du point de vue de la mécanique quantique, on dit que les états  $|\psi(t)\rangle$  et  $\overline{|\psi(t)\rangle}$  sont équivalents, et par conséquent décrivent le même phénomène physique, si  $\overline{|\psi(t)\rangle}$  satisfait aussi l'équation de Schrödinger pour un nouveau Hamiltonien Hermitien  $H$ .

En fait, en dérivant (2.42) partiellement par rapport à  $t$  et utilisant (2.41), on vérifie que  $\overline{|\psi(t)\rangle}$  satisfait l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \overline{|\psi(t)\rangle} = \left[ U^{-1}(t) H U(t) - i\hbar \frac{\partial U^{-1}}{\partial t} U(t) \right] \overline{|\psi(t)\rangle}, \quad (2.43)$$

qui est du type Schrödinger avec

$$\overline{H}(t) = U^{-1}(t) H U(t) - i\hbar \frac{\partial U^{-1}}{\partial t} U(t). \quad (2.44)$$

Cependant, en imposant l'hermiticité de  $\overline{H}(t)$ , on s'aperçoit que l'opérateur  $U(t)$  doit être unitaire, c'est-à-dire

$$U^+(t) = U^{-1}(t), \quad (2.45)$$

ou encore

$$U^+(t) U(t) = U(t) U^+(t) = I, \quad (2.46)$$

où  $I$  est l'opérateur identité.

On dit alors que l'opération (2.42) est une transformation unitaire. Elle assure la conservation du produit scalaire des différents états. En effet, en considérant la transformation (2.42) sur deux états quelconques  $|\psi_1(t)\rangle$  et  $|\psi_2(t)\rangle$  de l'espace de Hilbert,

$$\overline{|\psi_i(t)\rangle} = U^+(t) |\psi_i(t)\rangle, \quad i = 1, 2 \quad (2.47)$$

et tenant compte de la propriété d'unitarité (2.46), on obtient

$$\overline{\langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle} = \langle \psi_1(t) | \psi_2(t) \rangle, \quad (2.48)$$

qui signifie que le produit scalaire est conservé. Ainsi, l'interprétation probabiliste des vecteurs d'état de l'équation de Schrödinger est conservée dans une transformation unitaire.

Par ailleurs, pour que les deux systèmes d'états, c'est-à-dire les  $|\psi_i(t)\rangle$  et leurs transformés  $\overline{|\psi_i(t)\rangle}$ , soient complètement équivalents, il doit y avoir conservation des valeurs moyennes des observables. Ainsi, partant de la définition de la valeur moyenne d'une observable  $A(t)$  (qui peut dépendre explicitement du temps) dans un état  $|\psi_i(t)\rangle$  quelconque d'une représentation et tenant compte de (2.47), on peut écrire

$$\langle \psi_i(t) | A | \psi_i(t) \rangle = \overline{\langle \psi_i(t) | U^+(t) A U(t) | \psi_i(t) \rangle}. \quad (2.49)$$

Par conséquent, cette même observable doit être définie dans la nouvelle représentation comme

$$\overline{A} = U^+(t) A U(t). \quad (2.50)$$

Les transformations unitaires jouent un rôle très important dans la résolution de l'équation de Schrödinger dans certaines situations particulières. En effet, parfois pour simplifier la résolution de l'équation de Schrödinger associée à un Hamiltonien  $H(t)$  donné, il s'avère utile de procéder d'abord par des transformations unitaires successives jusqu'à ce qu'on arrive à une équation équivalente pour un nouveau Hamiltonien  $\tilde{H}(t)$ , dont la résolution de l'équation de Schrödinger correspondante est plus simple. Dans les systèmes exactement solubles, il existe toujours des opérateurs unitaires qui s'adaptent

à l'opération de simplification de l'équation de Schrödinger. En général, ces opérateurs sont constitués par l'exponentiation des générateurs de l'algèbre qui engendrent l'Hamiltonien du système. Dans la plupart des problèmes exactement solubles et lorsque l'ordre des transformations unitaires est judicieusement choisi, l'Hamiltonien final  $\tilde{H}(t)$  s'avère indépendant du temps. Dans ce cas, l'équation finale sera résolue simplement par séparation des variables d'espace et de temps. Ensuite, on procède par les transformations inverses pour obtenir les solutions de l'équation originale. Lorsque  $\tilde{H}(t)$  dépend explicitement du temps, le problème devient plus maniable pour être traité par la méthode des invariants, décrite plus haut.

## 2.5 Exemple illustratif

Comme exemple illustratif sur l'utilisation de la méthode des invariants et des transformations unitaires dans la résolution de l'équation de Schrödinger, considérons un système à un degré de liberté représentant un oscillateur harmonique forcé [17], décrit par l'Hamiltonien

$$I(t) = \hbar\omega_0\hat{n} + g(t)a^+ + g^*(t)a, \quad (2.51)$$

où  $\hat{n} = a^+a$ ,  $a$  et  $a^+$  représentent les opérateurs d'annihilation et de création bosoniques, satisfaisant

$$[a, a^+] = 1, \quad (2.52)$$

$\omega_0$  est un paramètre réel positif et  $g(t)$ , une fonction du temps, à priori complexe.

### Méthode des invariants

Pour résoudre l'équation de Schrödinger correspondante par la méthode des invariants, remarquons d'abord que  $a$ ,  $a^+$ ,  $a^+a$  et l'opérateur identité  $I$  forment une algèbre fermée. Considérons alors un opérateur invariant sous la forme

$$I(t) = \beta(t)\hat{n} + \alpha(t)a^+ + \alpha^*(t)a + \gamma(t), \quad (2.53)$$

où  $\beta(t)$  et  $\gamma(t)$  sont des fonctions réelles du temps et  $\alpha(t)$ , une fonction du temps à priori complexe.

En utilisant l'équation d'invariance (2.2), on obtient les équations auxiliaires déterminant les paramètres  $\alpha(t)$ ,  $\beta(t)$  et  $\gamma(t)$  sous la forme

$$\dot{\beta}(t) = 0, \quad (2.54a)$$

$$i\hbar\dot{\alpha}(t) = \hbar\omega_0\alpha + i\beta(t)g(t), \quad (2.54b)$$

$$i\hbar\dot{\gamma}(t) = g^*(t)\alpha(t) - g(t)\alpha^*(t). \quad (2.54c)$$

La solution générale du système d'équations (2.54) est donnée par

$$\beta(t) = \beta_0, \quad (2.55a)$$

$$\alpha(t) = e^{-i\omega_0 t} \left( \alpha_0 + \frac{i\beta_0}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_0 \tau} g(\tau) d\tau \right), \quad (2.55b)$$

$$\gamma(t) = \gamma_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t (\alpha_0 e^{-i\omega_0 \tau} g^*(\tau) + cc) d\tau + \frac{i\beta_0}{\hbar} \left| \int_0^t e^{i\omega_0 \tau} g(\tau) d\tau \right|, \quad (2.55c)$$

où les constantes arbitraires  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  et  $\gamma_0$  sont telles que  $\alpha_0$  est à priori complexe,  $\beta_0$  et  $\gamma_0$  sont réelles.

Ainsi, la forme de l'opérateur invariant, et par conséquent la solution du problème, dépend essentiellement du choix des constantes  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  et  $\gamma_0$ : Dans notre exemple, nous nous limitons à trouver la solution correspondant à un invariant manifestement quadratique, c'est-à-dire pour lequel  $\beta_0 \neq 0$ : Ainsi, sans perte de généralité, on prend  $\beta_0 = 1$ .

Afin de trouver les fonctions propres et les valeurs propre de  $I(t)$ , nous devons résoudre l'équation aux valeurs propres

$$I(t) |\varphi_\lambda(t)\rangle = \lambda |\varphi_\lambda(t)\rangle. \quad (2.56)$$

Pour ce faire, considérons la transformation

$$|\varphi_\lambda(t)\rangle = U(t) |\chi_\lambda\rangle, \quad (2.57)$$

où  $U(t)$  est un opérateur unitaire à déterminer. En insérant (2.57) dans (2.56) et multipliant les deux membres à gauche par  $U^+(t)$ ; on obtient la nouvelle équation

$$\tilde{I} |\chi_\lambda\rangle = \lambda |\chi_\lambda\rangle, \quad (2.58)$$

avec

$$\tilde{I} = U^+(t) I(t) U(t). \quad (2.59)$$

Le but est de choisir convenablement  $U(t)$  de sorte que le nouveau opérateur  $\tilde{I}$  soit indépendant du temps. Pour ce faire, considérons  $U(t)$  comme l'opérateur déplacement, qui s'écrit sous la forme

$$U(t) = \exp(\zeta^*(t) a - \zeta(t) a^+), \quad (2.60)$$

avec  $\zeta(t)$ , une fonction qui sera fixée de telle sorte à obtenir l'expression désirée pour l'opérateur  $\tilde{I}$ .

Sachant que

$$U^+(t) a U(t) = a - \zeta(t), \quad (2.61a)$$

$$U^+(t) a^+ U(t) = a^+ - \zeta^*(t), \quad (2.61b)$$

l'expression de  $\tilde{I}$  sera donnée par

$$\begin{aligned} \tilde{I} = & \hat{n} + (\alpha(t) - \zeta(t)) a^+ + (\alpha^*(t) - \zeta^*(t)) a \\ & + |\zeta(t)|^2 - \zeta^*(t) \alpha(t) - \zeta(t) \alpha^*(t) + \gamma(t). \end{aligned} \quad (2.62)$$

Puisque  $\zeta(t)$  est une fonction arbitraire, elle sera alors choisie de telle sorte que les

termes dépendants du temps dans le membre de droite de (2.62) disparaissent. Ainsi, on voit bien qu'il suffit de poser

$$\zeta(t) = \alpha(t), \quad (2.63)$$

et fixer les paramètres  $\alpha_0$  et  $\gamma_0$  de telle sorte que

$$\gamma_0 = |\alpha_0|^2. \quad (2.64)$$

L'opérateur  $\tilde{I}$  se réduit donc à une forme simple indépendante du temps, donnée par

$$\tilde{I} = \hat{n}, \quad (2.65)$$

qui peut être identifié, à une constante additive près, à l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique stationnaire.

Ainsi, les solutions de l'équation aux valeurs propres (2.58) sont données par

$$\lambda_n = n, \text{ avec } n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.66)$$

et

$$|\chi_n\rangle = |n\rangle. \quad (2.67)$$

Par conséquent, les états propres de l'opérateur invariant initial  $I(t)$  sont donnés par

$$|\varphi_n(t)\rangle = e^{(\zeta^*(t)a - \zeta(t)a^+)} |n\rangle. \quad (2.68)$$

Afin d'obtenir les solutions de l'équation de Schrödinger correspondant à l'opérateur invariant (2.53) avec la contrainte (2.64), calculons la phase  $\theta_n$  qu'il faut affecter à chaque état  $|\varphi_n(t)\rangle$ . Sachant que les valeurs propres  $n$  ne sont pas dégénérées et compte tenu de la relation (2.22), on peut écrire

$$\begin{aligned}
\hbar\dot{\theta}_n(t) &= \langle \varphi_n(t) | \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) | \varphi_n(t) \rangle \\
&= \langle n | U^+(t) \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) U(t) | n \rangle.
\end{aligned} \tag{2.69}$$

En utilisant les relations (2.61) et tenant compte de (2.63), on obtient

$$\begin{aligned}
U^+(t) H(t) U(t) &= \hbar\omega_0 (\hat{n} + |\zeta(t)|^2) - g^*(t) \zeta(t) - g(t) \zeta^*(t) \\
&\quad + (g(t) - \hbar\omega_0 \zeta(t)) a^+ + (g^*(t) - \hbar\omega_0 \zeta^*(t)) a.
\end{aligned} \tag{2.70}$$

Par ailleurs, en utilisant la fameuse formule de Baker-Campbell-Hausdorff [4] et la relation de commutation (2.52), on peut écrire l'opérateur invariant sous la forme

$$U(t) = e^{\frac{1}{2}|\zeta(t)|^2} e^{\zeta^*(t)a} e^{-\zeta(t)a^+}, \tag{2.71}$$

de sorte qu'un calcul direct conduit à

$$\frac{\partial U(t)}{\partial t} = U(t) \left( \frac{1}{2} \left( \dot{\zeta}(t) \zeta^*(t) - \zeta(t) \dot{\zeta}^*(t) \right) \right) + \dot{\zeta}^*(t) a - \dot{\zeta}(t) a^+, \tag{2.72}$$

et par conséquent

$$U^+(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} = \frac{1}{2} \left( \left( \dot{\zeta}(t) \zeta^*(t) - \zeta(t) \dot{\zeta}^*(t) \right) \right) + \dot{\zeta}^*(t) a - \dot{\zeta}(t) a^+. \tag{2.73}$$

En substituant (2.70) et (2.73) dans (2.69) et sachant que  $\langle n | a | n \rangle = \langle n | a^+ | n \rangle = 0$  et  $\langle n | \hat{n} | n \rangle = n$ , on obtient

$$\begin{aligned}
\dot{\theta}_n(t) &= \frac{i}{2} \left( \dot{\zeta}(t) \zeta^*(t) - \zeta(t) \dot{\zeta}^*(t) \right) - \omega_0 (\hat{n} + |\zeta(t)|^2) + \frac{1}{\hbar} (g(t) \zeta^*(t) + g^*(t) \zeta(t)), \\
&= -\omega_0 n + \frac{1}{2\hbar} (g(t) \alpha^*(t) + g^*(t) \alpha(t)),
\end{aligned} \tag{2.74}$$

où l'on a utilisé (2.54), (2.55) et (2.63).

Les fonctions d'onde, solutions de l'équation de Schrödinger seront alors données par

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-i\omega_0 nt + \frac{i}{2\hbar} \int_0^t (g(\tau)\alpha^*(\tau) + g^*(\tau)\alpha(\tau)) d\tau} e^{(\alpha^*(t)a - \alpha(t)a^+)} |n\rangle. \quad (2.75)$$

### Méthode des transformations unitaires (Opérateur d'évolution)

Afin de résoudre l'équation de Schrödinger pour l'Hamiltonien (2.51) par la méthode des transformations unitaires, commençons par la transformation définie par

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\phi(t)\rangle, \quad (2.76)$$

où  $U(t)$  est l'opérateur déplacement défini par (2.60).

Le nouveau état  $|\phi(t)\rangle$  satisfait donc une équation du type Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\phi(t)\rangle}{\partial t} = \overline{H(t)} |\phi(t)\rangle. \quad (2.77)$$

où  $H(t)$  est donné par (2.44), qu'on écrira sous une forme équivalente comme  $U^+(t) H(t) U(t)$

$$\begin{aligned} \overline{H(t)} &= U^+(t) H(t) U(t) + i\hbar \left( \frac{\partial U^+(t)}{\partial t} \right) U(t), \\ &= U^+(t) H(t) U(t) - i\hbar U^+ \left( \frac{\partial U(t)}{\partial t} \right). \end{aligned} \quad (2.78)$$

En se servant des résultats déjà obtenus dans (2.70) et (2.73), on obtient

$$\begin{aligned} \overline{H(t)} &= \hbar\omega_0 (\hat{n} + \zeta\zeta^*) - g^*(t)\zeta(t) - g(t)\zeta^*(t) - \frac{i\hbar}{2} \left( \dot{\zeta}(t)\zeta^*(t) - \zeta(t)\dot{\zeta}^*(t) \right) \\ &\quad + \left( g(t) - \hbar\omega_0\zeta(t) + i\hbar\dot{\zeta}(t) \right) a^+ + \left( g^*(t) - \hbar\omega_0\zeta^*(t) - i\hbar\dot{\zeta}^*(t) \right) a. \end{aligned} \quad (2.79)$$

Puisque la fonction  $\zeta(t)$  est encore libre, elle sera fixée de telle sorte que les termes linéaires par rapport à  $a$  et  $a^+$  dans (2.79) disparaissent. Ainsi,  $\zeta(t)$  satisfera l'équation différentielle

$$i\hbar\dot{\zeta}(t) = \hbar\omega_0\zeta(t) - g(t). \quad (2.80)$$

Avant de poursuivre, notons que l'équation différentielle (2.80) coïncide exactement avec l'équation (2.54b) si on remplace  $\zeta(t)$  par  $\alpha(t)$  et on prend  $\beta(t) = 1$ .

Compte tenu de la contrainte (2.80), le nouveau Hamiltonien sera réduit en

$$\overline{H(t)} = \hbar\omega_0\hat{n} - \frac{1}{2}g(t)\zeta^*(t) + g^*(t)\zeta(t). \quad (2.81)$$

Ainsi, la solution formelle de l'équation (2.77) sera donnée après intégration par

$$|\phi(t)\rangle = e^{\frac{i}{2\hbar}\int_0^t (g(\tau)\zeta^*(\tau) + g^*(\tau)\zeta(\tau))d\tau} e^{-in\omega_0 t} |\phi(0)\rangle, \quad (2.82)$$

et par conséquent, la solution de l'équation de Schrödingers'écrit sous la forme

$$|\psi(t)\rangle = e^{\frac{i}{2\hbar}\int_0^t (g(\tau)\zeta^*(\tau) + g^*(\tau)\zeta(\tau))d\tau} e^{(\zeta^*(t)a - \zeta(t)a^+)} e^{-in\omega_0 t} |\phi(0)\rangle, \quad (2.83)$$

où  $|\phi(0)\rangle$  est un état arbitraire de l'espace de Hilbert.

En particulier, si on choisit  $|\phi(0)\rangle = |n\rangle$ , on obtient

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-n\omega_0 t + \frac{i}{2\hbar}\int_0^t (g(\tau)\zeta^*(\tau) + g^*(\tau)\zeta(\tau))d\tau} e^{(\zeta^*(t)a - \zeta(t)a^+)} |n\rangle, \quad (2.84)$$

qui coïncide exactement avec la solution obtenue par la méthode des invariants. Ainsi, nous pouvons conclure que les deux méthodes sont équivalentes. Autrement dit, les solutions obtenues à partir d'un invariant donné correspondent à celles qu'on obtient par la méthode des transformations unitaires pour un état initial particulier. On peut donc dire que le choix d'un opérateur invariant particulier dans la méthode de Lewis-Riesenfeld est équivalent au choix d'un état initial particulier dans la méthode de l'opérateur d'évolution.

## 2.6 Conclusion

Nous avons développé dans ce chapitre la méthode des invariants pour résoudre exactement l'équation de Schrödinger dans certains problèmes avec Hamiltonien dépendant explicitement du temps. Nous avons montré qu'une fois qu'on a construit un opérateur invariant associé à un Hamiltonien donné, il suffit de résoudre son équation aux valeurs propres pour en déduire directement les solutions de l'équation de Schrödinger. Cette technique ne peut pas remplacer les méthodes directes de résolution de l'équation de Schrödinger dans tous les problèmes mais elle constitue une alternative qui peut s'avérer mieux adaptée pour certains problèmes que d'autres. Elle possède aussi l'avantage que les solutions obtenues à partir d'un invariant donné forment un ensemble complet de solutions.

Nous avons aussi discuté brièvement la résolution de l'équation de Schrödinger par la technique des transformations unitaires.

Dans le but d'éclaircir la différence entre les deux techniques, nous avons incorporé à la fin du travail un exemple illustratif concernant la résolution de l'équation de Schrödinger associée à un oscillateur harmonique forcé à une dimension. Nous avons présenté brièvement la solution du problème par les deux techniques et montré leur équivalence tout en commentant l'intérêt de chacune d'elles.

# Chapitre 3

## Ensembles complets de solutions de l'équation de Schrödinger d'une particule dans le potentiel linéaire dépendant du temps par la méthode des Invariants

### 3.1 Introduction

La résolution de l'équation de Schrödinger pour des Hamiltoniens non stationnaires se limite en général à des solutions approchées qui sont obtenues par des méthodes perturbatives ou numériques. Il existe très peu de problèmes dépendants du temps qui se prêtent à des solutions exactes, comme par exemple le problème d'une particule soumise à une force uniforme dans l'espace et variable dans le temps (potentiel linéaire dépendant du temps), ou à une force linéaire dans l'espace et variable dans le temps (potentiel quadratique dépendant du temps). Généralement, les solutions exactes de ces deux potentiels peuvent servir de bases à partir desquelles on peut développer des solutions approchées pour d'autres potentiels plus généraux. Par conséquent, les solutions de ces deux potentiels sont d'un intérêt capital en mécanique quantique non stationnaire.

Nous allons nous intéresser dans ce chapitre à la résolution de l'équation de Schrödinger par l'approche des invariants, initiée par Lewis-Riesenfeld [7], pour l'Hamiltonien d'une particule neutre, soumise à une force extérieure unidimensionnelle, uniforme dans l'espace et variable dans le temps. Ceci est aussi équivalent au problème d'une particule chargée, soumise à un champ électrique uniforme dans l'espace et variable dans le temps, orienté dans une direction fixe et dont le champ magnétique associé est nul.

En fait, ce problème a été abordé dans la littérature par plusieurs auteurs, aboutissant à différentes solutions [18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27]. Pour la première fois la méthode des invariants a été utilisée par Guedes pour résoudre ce problème [18]. En proposant un opérateur invariant linéaire par rapport à l'opérateur impulsion, l'auteur avait obtenu des solutions du type ondes planes. Il a été mentionné aussi dans ce travail qu'il est possible de construire une solution du type paquet d'onde d'Airy par une certaine superposition des solutions obtenues. Des solutions similaires avaient été obtenues aussi dans le travail de Feng [19] par le biais de transformations spatio-temporelles. En suivant une démarche basée sur les transformations unitaires, des solutions du type paquet d'ondes d'Airy ont été également rapportées par Song [20]. Plus tard, Bauer [21] montra que la solution proposée dans la référence [18] est un cas spécial de la solution dite de Volkov, obtenue bien avant. Cette disparité des solutions obtenues a suscité un long débat, notamment concernant l'utilisation de l'approche des invariants [22, 23]. Dans la critique rapportée par Bekkar et al [22], il a été montré que l'invariant utilisé par Guedes représente un cas particulier d'un invariant plus général, linéaire par rapport à l'opérateur impulsion et ne dépendant pas de l'opérateur position. Ainsi, un ensemble complet de solutions du type onde plane a été enfin donné par Bekkar et al [22], à partir duquel il sera en principe possible d'obtenir d'autres ensembles complets de types différents. Plus tard, Luan et al [23] proposèrent un opérateur invariant linéaire par rapport aux opérateurs impulsion et position mais dont le coefficient de l'opérateur position est purement imaginaire. L'invariant ainsi utilisé n'est pas un opérateur Hermitien, comme l'exige la théorie de Lewis et Riesenfeld, mais néanmoins il a été ainsi montré qu'il est possible d'obtenir une solution (et non pas un ensemble complet de solutions) représentant un paquet d'ondes Gaussien. Récemment, un ensemble complet de solutions du type oscillateur harmonique a été présenté dans la référence [27] en se basant sur un invariant quadratique ayant une forme particulière.

Le but du travail de ce chapitre consiste à l'unification des résultats obtenus par l'approche des invariants [28]. Nous montrons comment générer trois opérateurs invariants Hermitiens et linéairement indépendants à partir desquels découlent trois ensembles complets de solutions de types : ondes planes, fonctions d'Airy et oscillateurs harmoniques. Nous montrons aussi que ces ensembles complets de solutions peuvent être obtenus les uns des autres par des superpositions linéaires appropriées.

## 3.2 Hamiltonien du système

Il est clair, d'après les équations de Maxwell [29], qu'il est toujours possible de réaliser une expérience dans laquelle le champ magnétique, associé à un champ électrique uniforme et variable dans le temps, est identiquement nul. On dit alors qu'on a un champ électrique seul. Dans cette situation, l'Hamiltonien d'une particule de masse  $m$  et de charge  $q$ , placée dans ce champ électrique est la somme de la partie cinétique et de l'énergie potentielle. Si l'on dénote par  $-f(t)$  la force extérieure agissant sur la particule, se mouvant sur l'axe  $OX$ , c'est-à-dire  $-f(t) = qE(t)$  où  $E(t)$  est la composante du champ électrique, l'Hamiltonien classique du système s'écrit alors comme

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + f(t)x, \quad (3.1)$$

où  $x \equiv x_c(t)$  et  $p \equiv p_c(t)$  représentent respectivement la position et l'impulsion classiques de la particule, qui sont des fonctions du temps.

Il est facile de montrer que les équations classiques du mouvement [30] pour les variables  $x_c(t)$  et  $p_c(t)$ , appelées aussi équations canoniques de Hamilton-Jacobi, s'écrivent

$$\dot{x}_c(t) = \frac{\partial H}{\partial p_c} = \frac{p_c(t)}{m}, \quad (3.2)$$

et

$$\dot{p}_c(t) = -\frac{\partial H}{\partial x_c} = -f(t). \quad (3.3)$$

Ces équations peuvent être intégrées facilement pour donner

$$p_c(t) = p_c(0) - f_1(t), \quad (3.4)$$

$$x_c(t) = x_c(0) + \frac{p_c(0)}{m}t - \frac{f_2(t)}{m}, \quad (3.5)$$

où  $f_1(t)$  et  $f_2(t)$  sont données par

$$f_1(t) = \int_0^t d\tau f(\tau), \quad (3.6a)$$

$$f_2(t) = \int_0^t d\tau \int_0^\tau d\varsigma f(\varsigma), \quad (3.6b)$$

et  $x_c(0)$  et  $p_c(0)$  représentent respectivement les valeurs initiales de la position et l'impulsion de la particule classique.

Le traitement quantique du problème est basé, d'après les règles de quantification et le principe de Heisenberg, sur le remplacement des grandeurs classiques  $x_c(t)$  et  $p_c(t)$  par des observables  $X$  et  $P$ , auxquelles correspondent des opérateurs  $\hat{x}$  et  $\hat{p}$  vérifiant la relation de commutation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (3.7)$$

Dans la représentation position, les opérateurs position et impulsion prennent la forme  $\hat{x} \equiv x$  et  $p \equiv \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  s'écrit dans cette représentation sous la forme

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + f(t)x, \quad (3.8a)$$

$$= \frac{-\hbar^2}{2m} + f(t)x, \quad (3.8b)$$

où  $x$  et  $p$  sont maintenant des opérateurs satisfaisant la relation de commutation (3.7).

### 3.3 Opérateur invariant

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, l'évolution du système dans le temps est caractérisée par l'évolution de la fonction d'onde  $\psi(x, t)$ , régie par l'équation Schrödinger qui s'écrit dans la représentation position sous la forme

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left( \frac{p^2}{2m} + f(t)x \right) \psi(x, t), \quad (3.9)$$

avec  $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ .

Nous nous proposons de résoudre l'équation de Schrödinger(3.9) en utilisant l'approche des invariants, initiée par Lewis et Riesenfeld [7], (voir chapitre 2). Remarquons tout d'abord que l'Hamiltonien est une combinaison linéaire des opérateurs  $x$  et  $p^2$  qu'on peut considérer comme des générateurs de plusieurs algèbres fermées de dimensions finies. On cite par exemple l'algèbre de dimension 4

$$A_4 = \{1, x, p, p^2\}, \quad (3.10)$$

où l'algèbre de dimension 6

$$A_6 = \{1, x, p, x^2, p^2, xp + px\}, \quad (3.11)$$

qui sont fermées par rapport à l'opération de commutation entre deux éléments quelconques de l'algèbre.

Dans ce travail, nous considérons l'algèbre  $A_6$  de sorte que, d'après la théorie exposée dans le chapitre 2 et la relation (3.33), on cherche un opérateur invariant Hermitien général sous la forme

$$I(t) = \alpha(t)p^2 + \beta(t)(xp + px) + \gamma(t)x^2 + \eta(t)x + \rho(t)p + \delta(t), \quad (3.12)$$

où les coefficients  $\alpha(t), \beta(t), \gamma(t), \eta(t), \rho(t)$  et  $\delta(t)$  sont des fonctions réelles du temps qui seront choisies de telle sorte à satisfaire l'équation de l'invariant

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)]. \quad (3.13)$$

En tenant compte de la relation de commutation (3.7), il vient que

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [I, H] &= \frac{2\beta(t)}{m} p^2 - 2\beta(t) f(t) x + \frac{\gamma(t) \hbar}{m} (xp + px) \\ &+ \left( \frac{\eta}{m} - 2\alpha(t) f(t) \right) p - \rho(t) f(t). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Par ailleurs, on a

$$\frac{\partial I}{\partial t} = \dot{\alpha}(t) p^2 + \dot{\beta}(t) (xp + px) + \dot{\gamma}(t) x^2 + \dot{\eta}(t) x + \dot{\rho}(t) p + \dot{\delta}(t). \quad (3.15)$$

En insérant les deux équations (3.14) et (3.15) dans (3.13) et identifiant les termes semblables entre les deux membres, on obtient le système d'équations différentielles linéaires couplées suivant

$$\dot{\alpha}(t) = -\frac{2\beta(t)}{m}, \quad (3.16a)$$

$$\dot{\beta}(t) = -\frac{\Delta(t)}{m}, \quad (3.16b)$$

$$\dot{\gamma}(t) = 0, \quad (3.16c)$$

$$\dot{\eta}(t) = 2\beta(t) f(t), \quad (3.16d)$$

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{\eta(t)}{m} + 2\alpha(t) f(t), \quad (3.16e)$$

$$\dot{\delta}(t) = \rho(t) f(t). \quad (3.16f)$$

Après intégration, on obtient les solutions générales des équations (3.16) comme suit

$$\gamma(t) = \gamma_0, \quad (3.17a)$$

$$\beta(t) = \beta_0 - \frac{\gamma_0}{m}t, \quad (3.17b)$$

$$\alpha(t) = \alpha_0 - \frac{2\beta_0}{m}t + \frac{\gamma_0}{m^2}t^2, \quad (3.17c)$$

$$\eta(t) = \eta_0 + 2\beta(t)f_1(t) + 2\frac{\gamma_0}{m}f_2(t), \quad (3.17d)$$

$$\rho(t) = \rho_0 - \frac{\eta_0}{m}t + 2\alpha(t)f_1(t) + \frac{2\beta(t)}{m}f_2(t), \quad (3.17e)$$

$$\delta(t) = \delta_0 + \left(\rho_0 - \frac{\eta_0}{m}t\right)f_1(t) + \alpha(t)f_1^2(t) + \frac{\eta_0}{m}f_2(t) + \frac{2\beta(t)}{m}f_1(t)f_2(t) + \frac{\gamma_0}{m^2}f_2^2(t), \quad (3.17f)$$

où  $f_1(t)$  et  $f_2(t)$  sont données par les relations (3.6). Les coefficients initiaux sont des paramètres réels qui seront fixés par les conditions physiques initiales du système et aussi selon le type de la solution quantique désirée. Par ailleurs, puisque  $\alpha(t)$  est le coefficient de l'opérateur différentiel d'ordre le plus élevé, on peut dire que la dynamique du système est gouvernée essentiellement par les paramètres initiaux  $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ .

L'étape suivante est de chercher les solutions de l'équation aux valeurs propres de l'opérateur Hermitien  $I(t)$ ,

$$I(t)\varphi_\lambda(x,t) = \lambda\varphi_\lambda(x,t), \quad (3.18)$$

telles que les valeurs propres  $\lambda$  sont réelles et indépendantes du temps,  $\frac{\partial\lambda}{\partial t} = 0$  et les fonctions propres correspondantes  $\varphi_\lambda(x,t)$ , qui dépendent éventuellement du temps, forment un ensemble complet de fonctions. Par ailleurs, comme nous l'avons déjà mentionné, les solutions de (3.18) dépendent essentiellement de la fonction  $\alpha(t)$ , qui est le coefficient de la puissance la plus élevée de l'opérateur différentiel  $p$  : En tant que fonction du temps,  $\alpha(t)$  ne doit pas changer de signe sur tout l'intervalle  $[0, +\infty[$ , ce qui correspond à trois cas de figure possibles. Le premier est lorsque  $\alpha(t)$  est identiquement nul, correspondant au choix  $\alpha_0 = \beta_0 = \gamma_0 = 0$ . Dans ce cas, l'invariant se réduit à un opérateur qui est au plus linéaire par rapport aux opérateurs position et impulsion. On se ramène alors à l'algèbre  $A_4$  : Le deuxième cas est tel que  $\alpha(t)$  garde une valeur constante non

nulle, correspondant au choix  $\beta_0 = \gamma_0 = 0$  et  $\alpha_0 \neq 0$  : Ainsi, l'opérateur invariant est semi quadratique, c'est-à-dire qu'il est quadratique par rapport à l'opérateur impulsion et au plus linéaire par rapport à l'opérateur position. Enfin,  $\alpha(t)$  évolue dans le temps tout en ne s'annulant jamais, ce qui correspond  $\beta_0^2 - \alpha_0\gamma_0 < 0$ . Ceci implique forcément que  $\alpha_0 \neq 0$  et  $\gamma_0 \neq 0$  simultanément et  $\alpha_0\gamma_0 > 0$  et par conséquent l'opérateur invariant est quadratique à la fois par rapport à l'opérateur impulsion et à l'opérateur position. En dehors de ces trois choix, les solutions de l'équation aux valeurs propres (3.18) présenteront des changements d'allures d'allures dans le temps et par conséquent elles ne peuvent pas correspondre à des solutions physiques.

Dans ce qui suit, nous allons considérer ces trois choix séparément et en déduire pour chaque choix un ensemble complet de solutions.

### 3.4 Invariant linéaire et ensemble complet de solutions correspondantes

Comme il a été mentionné, si l'on choisit tels que  $\alpha(t) \equiv 0$ , tels que

$$\alpha_0 = 0, \gamma_0 = 0, \beta_0 = 0, \quad (3.19)$$

l'opérateur invariant  $I(t)$  se réduira à une forme linéaire, donnée par

$$I_L(t) = \rho_L p + \eta_0 x + \delta_L(t), \quad (3.20)$$

avec

$$\rho_L(t) = \rho_0 - \frac{\eta_0}{m}t, \quad (3.21)$$

$$\delta_L(t) = \gamma_0 + \rho_L(t) f_1(t) + \frac{\eta_0}{m} f_2(t) \quad (3.22)$$

Pour la même raison citée plus haut, la fonction  $\delta_L(t)$ , que nous considérons sans dimension, doit aussi garder la même allure au cours du temps et par conséquent les paramètres initiaux  $\rho_0$  et  $\eta_0$  doivent être fixés judicieusement. Il est facile de se convaincre

qu'il existe en principe deux cas de figure. Le premier consiste à prendre  $\eta_0 = 0$  et  $\rho_0 \neq 0$ , qui signifie que  $\delta_L(t)$  demeure constant dans le temps. Dans ce cas, l'invariant coïncide avec celui utilisé dans les références [22, 28], qu'on appellera invariant semi-linéaire car il dépend seulement de l'opérateur impulsion mais ne dépend pas de l'opérateur position. Dans le deuxième cas de figure, on prend  $\eta_0 \neq 0$  et  $\rho_0 \neq 0$  avec la condition  $\eta_0 \rho_0 \prec 0$ . La fonction  $\delta_L(t)$  évolue donc dans le temps tout en ne s'annulant jamais. Ces deux cas de figure, qui sont à priori physiquement indépendants, peuvent être regroupés dans une seule étude unifiée en considérant  $\rho_0 \neq 0$  et imposant la condition généralisée  $\eta_0 \rho_0 \preceq 0$ .

Aussi, sans perte de généralité, on prend  $\delta_0 = 0, \rho_0 = 1$ , de sorte que  $\delta_L(t)$  demeure toujours positive. L'invariant peut se mettre sous la forme

$$I_L(t) = \bar{\rho}_L(t) p - |\eta_0| x + \bar{\delta}_L(t), \quad (3.23)$$

avec

$$\bar{\rho}_L(t) = 1 + \frac{|\eta_0|}{m} t, \quad (3.24)$$

$$\bar{\delta}_L(t) = \gamma_0 + \bar{\rho}_L(t) f_1(t) - \frac{|\eta_0|}{m} f_2(t). \quad (3.25)$$

Notons que les résultats des travaux [22, 28] seront retrouvés en allant à la limite  $\eta_0 = 0$ .

### 3.4.1 Fonctions propres et valeurs propres de l'invariant linéaire $I_L(t)$

Le but est de résoudre l'équation aux valeurs propres de l'opérateur invariant linéaire  $I_L(t)$

$$I_L(t)\varphi_\lambda(x, t) = \lambda\varphi_\lambda(x, t), \quad (3.26)$$

pour des valeurs propres indépendantes du temps.

Pour accomplir ce but, procédons par une transformation unitaire dont le but est de réduire l'équation (3.26) en une nouvelle équation complètement indépendante du temps. Considérons donc la transformation unitaire définie par

$$\varphi_\lambda(x, t) = U_L(t) \bar{\varphi}_\lambda(x), \quad (3.27)$$

où  $U_L(t)$  est un opérateur unitaire,  $U_L^+(t) U_L(t) = U_L(t) U_L^+(t) = 1$ , qu'on doit déterminer, et  $\bar{\varphi}_\lambda(x)$  est une fonction indépendante du temps. En reportant (3.27) dans (3.26), on obtient la nouvelle équation

$$\bar{I}_L \bar{\varphi}_\lambda(x) = \lambda \bar{\varphi}_\lambda(x), \quad (3.28)$$

où  $\bar{I}_L$  est le transformé de l'opérateur invariant  $I_L(t)$ , donné par

$$\bar{I}_L = U_L^+(t) I_L(t) U_L(t). \quad (3.29)$$

L'objectif est alors de fixer  $U_L(t)$  de telle sorte que  $\bar{I}_L$  ne dépende pas explicitement du temps et qu'il soit à priori le plus simple possible. Pour ce faire, choisissons  $U_L(t)$  sous la forme

$$U_L(t) = U_1(t) U_2(t), \quad (3.30)$$

avec

$$U_1(t) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (A(t)x + B(t)x^2) \right], \quad (3.31)$$

et

$$U_2(t) = \exp \left[ \frac{iC(t)}{2\hbar} (xp + px) \right]. \quad (3.32)$$

Sachant que

$$U_1^+(t)xU_1(t) = x, \quad (3.33)$$

$$U_1^+(t)pU_1(t) = p - 2B(t)x - A(t), \quad (3.34)$$

$$U_2^+(t)xU_2(t) = xe^{-C(t)}, \quad (3.35)$$

$$U_2^+(t)pU_2(t) = pe^{C(t)}, \quad (3.36)$$

on obtient

$$\bar{I}_L = \bar{\rho}_L(t)e^{C(t)}p - (|\eta_0| + 2B(t)\bar{\rho}_L(t))e^{-C(t)}x + \bar{\delta}_L(t) - A(t)\bar{\rho}_L(t). \quad (3.37)$$

Pour que  $\bar{I}_L$  soit indépendant du temps et ayant la forme la plus simple possible, il convient de fixer  $A(t)$ ;  $B(t)$  et  $C(t)$  comme

$$A_1 = \frac{\bar{\delta}_L(t)}{\bar{\rho}_L(t)} = f_1(t) - \frac{|\eta_0|}{m} \frac{f_2(t)}{\bar{\rho}_L(t)}, \quad (3.38a)$$

$$B(t) = -\frac{|\eta_0|}{2\bar{\rho}_L(t)}, \quad (3.38b)$$

$$C(t) = -\ln(\bar{\rho}_L(t)). \quad (3.38c)$$

Ainsi,  $\bar{I}_L$  est réduit à l'opérateur impulsion,

$$\bar{I}_L = p, \quad (3.39)$$

dont les fonctions propres sont les ondes planes

$$\bar{\varphi}_\lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}\lambda x}, \quad (3.40)$$

et les valeurs propres  $\lambda$  forment un spectre continu,  $\lambda \in \mathbb{R}$  et de plus elles ne sont pas dégénérées. Le facteur  $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ , défini à une constante de phase près, est introduit pour que les  $\bar{\varphi}_\lambda(x)$  forment un ensemble complet de fonctions sur  $\mathbb{R}$ .

En reportant (3.40) dans (3.27) et utilisant (3.33) et (3.35), il vient alors que les fonctions propres  $\varphi_\lambda(x, t)$  s'expriment sous la forme

$$\varphi_\lambda(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\bar{\rho}_L(t)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{[\lambda - \bar{\delta}_L(t)x] + \frac{|\eta_0|}{2}x^2}{\bar{\rho}_L(t)} \right]. \quad (3.41)$$

Notons enfin qu'il est bien établi que l'invariant  $I_L(t)$  forme à lui seul un E.C.O.C.

### 3.4.2 Phases globales et solutions du type onde plane

Pour obtenir les solutions de l'équation de Schrödinger(3.9), et sachant que les valeurs propres de  $I(t)$  ne sont pas dégénérées, les phases  $\theta_\lambda(t)$  sont obtenues à partir de l'équation (3.22) (voir chapitre 2), qui s'écrit ici comme

$$\hbar\dot{\theta}_\lambda(t) \varphi_\lambda(x, t) = \left( i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \varphi_\lambda(x, t). \quad (3.42)$$

Pour ce faire, il suffit de reporter (3.1) et (3.41) dans (3.42) et effectuer les opérations de dérivation dans le membre de droite. On s'aperçoit que les termes proportionnels à  $x$  et  $x^2$  s'éliminent identiquement et le terme restant, qui est une fonction du temps, sera alors identifié avec  $\dot{\theta}_\lambda(t)$ . On obtient donc la phase sous la forme

$$\theta_\lambda(t) = -\frac{1}{2\hbar m} \int^t d\tau \left( \frac{\lambda - \bar{\delta}_L(\tau)}{\bar{\rho}_L(\tau)} \right)^2. \quad (3.43)$$

Finalement, les solutions de l'équation de Schrödinger (3.9) relatives à l'invariant linéaire (3.23) peuvent être mises sous la forme (voir chapitre 2)

$$\psi_\lambda(x, t) = \frac{-\frac{i}{2\hbar m} \int^t d\tau \left( \frac{\lambda - \bar{\delta}_L(\tau)}{\bar{\rho}_L(\tau)} \right)^2}{\sqrt{2\pi\hbar\bar{\rho}_L(t)}} \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \frac{[\lambda - \bar{\delta}_L(t)x] + \frac{|\eta_0|}{2}x^2}{\bar{\rho}_L(t)} \right]. \quad (3.44)$$

En utilisant la définition bien connue de la distribution de Dirac, donnée par

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\delta(p-q)u} du = \frac{1}{|\delta|} \delta(p - q), \quad (3.45)$$

on peut vérifier aisément que les solutions (3.44) forment un ensemble complet satisfaisant aux relations d'orthonormalisation et de fermeture suivantes

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{\lambda}^*(x, t) \psi_{\lambda}(x, t) = \delta(\lambda - \dot{\lambda}), \quad (3.46)$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \psi_{\lambda}^*(x, t) \psi_{\lambda}(\dot{x}, t) = \delta(x - \dot{x}). \quad (3.47)$$

Dans le cas particulier où  $\eta_0 = 0$ , les solutions (3.44) se réduisent à celles rapportées dans les références [22, 28], qui seront données par des fonctions du type onde plane

$$\psi_{\lambda}(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{2\hbar m} \int^t d\tau [\lambda - f_1(\tau)]^2\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} [\lambda - f_1(t) x]\right). \quad (3.48)$$

### 3.5 Invariant semi-quadratique et ensemble complet de solutions correspondantes

Un invariant semi-quadratique, c'est-à-dire qui est seulement quadratique par rapport à l'opérateur impulsion, est obtenu en considérant le choix particulier des paramètres initiaux  $\alpha_0, \beta_0$  and  $\gamma_0$  tels que

$$\alpha_0 \neq 0, \gamma_0 = 0, \beta_0 = 0, \quad (3.49)$$

Sans perte de généralité, on peut considérer que  $\alpha_0$  est un paramètre sans dimension et poser  $\alpha_0 = 1$ , de sorte que l'opérateur invariant peut être réduit à la forme simple

$$I_{SQ}(t) = p^2 + \eta_0 x + \rho_{SQ}(t)p + \delta_{SQ}(t), \quad (3.50)$$

avec

$$\rho_{SQ}(t) = \rho_0 - \frac{\eta_0}{m} t + 2f_1(t), \quad (3.51)$$

et

$$\delta_{SQ}(t) = \left( \rho_0 - \frac{\eta_0}{m} t \right) f_1(t) + \frac{\eta_0}{m} f_2(t) + f_1^2(t). \quad (3.52)$$

Dans ce qui suit, nous allons admettre que  $\eta_0 \neq 0$ .

### 3.5.1 Fonctions propres et valeurs propres de $I_{SQ}(t)$

Afin de résoudre l'équation aux valeurs propres

$$I_{SQ}(t)\chi_\nu(x, t) = \nu\chi_\nu(x, t), \quad (3.53)$$

nous allons procéder comme dans la section 3.3.1 par une transformation unitaire qui réduit (3.53) en une équation indépendante du temps.

En posant

$$\chi_\nu(x, t) = U_{SQ}(t)\bar{\chi}_\nu(x), \quad (3.54)$$

et reportant (3.54) dans (3.53), on obtient

$$\bar{I}_{SQ}\bar{\chi}_\nu(x) = \nu\bar{\chi}_\nu(x), \quad (3.55)$$

avec

$$\bar{I}_{SQ} = U_{SQ}^+(t)I_{SQ}(t)U_{SQ}(t). \quad (3.56)$$

En choisissant l'opérateur unitaire  $U_{SQ}(t)$  sous la forme

$$U_{SQ}(t) = \exp\left(i\frac{A_2(t)}{\hbar}x\right)\exp\left(i\frac{A_1(t)}{\hbar}p\right), \quad (3.57)$$

on vérifie aisément que les transformées des opérateurs position  $x$  et impulsion  $p$  sont données par

$$U_{SQ}^+(t)xU_{SQ}(t) = x - A_1, \quad (3.58)$$

$$U_{SQ}^+(t)pU_{SQ}(t) = p + A_2. \quad (3.59)$$

Ainsi, l'opérateur  $\bar{I}_{SQ}$  sera donné par l'expression

$$\bar{I}_{SQ} = p^2 + \eta_0 x + [2A_2(t) + \rho_{SQ}(t)] p + A_2^2(t) - \eta_0 A_1(t) + \rho_{SQ}(t) A_2(t) + \delta_{SQ}(t). \quad (3.60)$$

Puisque  $A_1(t)$  et  $A_2(t)$  sont des paramètres libres, nous les choisissons de telle sorte que  $\bar{I}_{SQ}$  ne dépende pas explicitement du temps. Ils seront donc fixés comme

$$A_1(t) = \frac{1}{\eta_0} \left( \delta_{SQ}(t) - \frac{\rho_{SQ}(t)^2}{4} \right), \quad (3.61)$$

$$A_2(t) = -\frac{\rho_{SQ}(t)}{2}, \quad (3.62)$$

et par conséquent  $\bar{I}_{SQ}$  se réduit à la forme simple

$$\bar{I}_{SQ} = p^2 + \eta_0 x, \quad (3.63)$$

qui ressemble à l'Hamiltonien d'une particule à une dimension, de masse égale à  $\frac{1}{2}$ , placée dans le potentiel linéaire  $V(x) = \eta_0 x$ . Les solutions de l'équation aux valeurs propres (3.55) sont donc du type fonction d'Airy [31], comme nous allons le voir.

En reportant (3.63) dans (3.55), on voit que cette dernière s'écrit explicitement sous la forme

$$-\hbar^2 \bar{\chi}_\nu''(x, t) + (\eta_0 x - \nu) \bar{\chi}_\nu(x, t) = 0. \quad (3.64)$$

En procédant maintenant par une transformation ponctuelle sur l'équation (3.64), définie par

$$x = \left( \frac{\hbar^2}{\eta_0} \right)^{\frac{1}{3}} z + \frac{\nu}{\eta_0}, \quad (3.65)$$

et

$$\bar{\chi}_\nu(x) = \widetilde{\bar{\chi}}_\nu(z), \quad (3.66)$$

il est aisé de voir que la nouvelle fonction

$$-\widetilde{\chi}_\nu''(z) + z\widetilde{\chi}_\nu(z) = 0, \quad (3.67)$$

dont la solution peut être exprimée par la fonction d'Airy  $Ai(z)$  [31], définie sous forme intégrale par

$$\widetilde{\chi}_\nu(z) \sim Ai(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left(\frac{u^3}{3} + uz\right)} du. \quad (3.68)$$

En effectuant la transformation inverse, on peut mettre les solutions  $\bar{\chi}_\nu(x)$  sous la forme

$$\bar{\chi}_\nu(x) = C_\nu Ai \left[ \left( \frac{\eta_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left( x - \frac{\nu}{\eta_0} \right) \right], \quad (3.69)$$

où  $\nu$  est une constante réelle arbitraire,  $\nu \in \mathbb{R}$ ; et  $C_\nu$ , une constante à priori arbitraire mais qui peut être convenablement fixée de telle sorte que les solutions (3.69) forment un ensemble complet de fonctions sur  $\mathbb{R}$ . En effet, on peut écrire

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\chi}_\nu^*(x) \bar{\chi}_{\nu'}(x) &= C_{\nu'}^* C_\nu \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{ds}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{i}{3}(t^3 - s^3)} e^{i(\eta_0 \hbar)^{-\frac{2}{3}}(\nu s - \nu' t)} \times \\ &\quad \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\left(\frac{\eta_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}(t-s)x} dx. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Compte tenu de (3.45), le membre de droite de (3.70) peut être évalué aisément pour obtenir finalement

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\chi}_\nu^*(x) \bar{\chi}_{\nu'}(x) = |C_\nu|^2 (\hbar^4 \eta_0)^{\frac{1}{3}} \delta(\nu - \nu'). \quad (3.71)$$

Par conséquent, il suffit de fixer  $C_\nu$ , à une constante de phase près, comme

$$C_\nu = (\hbar^4 \eta_0)^{-\frac{1}{6}}, \quad (3.72)$$

pour que les  $\bar{\chi}_\nu(x)$  satisfassent la relation d'orthonormalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\chi}_\nu^*(x) \bar{\chi}_\nu(x) = \delta(\nu - \nu'). \quad (3.73)$$

Par ailleurs, en tenant compte maintenant de (3.72) et utilisant encore la relation (3.45), on s'aperçoit que les solutions  $\bar{\chi}_\nu(x)$  satisfassent aussi la relation de fermeture

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \bar{\chi}_\nu^*(x) \bar{\chi}_\nu(\hat{x}) = \delta(x - \hat{x}), \quad (3.74)$$

et par conséquent elles forment un ensemble complet de fonctions.

Par ailleurs, les valeurs propres ne sont pas dégénérées et  $I_{SQ}(t)$  forme à lui seul un E.C.O.C.

Enfin, en utilisant (3.54) et compte tenu de (3.57), (3.58), (3.61) et (3.62), les fonctions propres de l'opérateur invariant  $I_{SQ}(t)$  peuvent être mises sous la forme

$$\chi_\nu(x, t) = (\hbar^4 \eta_0)^{-\frac{1}{6}} \exp(-i \frac{\rho_{SQ}(t)x}{2\hbar}) Ai \left[ \left( \frac{\eta_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left( x + \frac{1}{\eta_0} \left( \delta_{SQ}(t) - \frac{\rho_{SQ}(t)^2}{4} + \nu \right) \right) \right], \quad (3.75)$$

qui forment un ensemble complet sur  $\mathbb{R}$ .

### 3.5.2 Phases globales et solutions du type paquet d'ondes d'Airy

Comme les valeurs propres  $\nu$  ne sont pas dégénérées, les phases globales  $\theta_\nu(t)$  peuvent être calculées à partir de la relation (2.22), qui s'écrit dans ce cas comme

$$\hbar \dot{\theta}_\nu(t) \chi_\nu(x, t) = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \chi_\nu(x, t). \quad (3.76)$$

En reportant (3.1) et (3.75) dans (3.76) et effectuant les dérivations dans le membre de droite, on s'aperçoit que les termes proportionnels à  $x$  s'éliminent identiquement. La fonction du temps qui demeure dans le membre de droite sera donc identifiée avec  $\hbar \dot{\theta}_\nu(t)$ .

On obtient alors

$$\dot{\theta}_\nu(t) = \frac{1}{2\hbar m} \left[ \delta_{SQ}(t) - \frac{\rho_{SQ}(t)^2}{2} - \nu \right], \quad (3.77)$$

où encore

$$\theta_\nu(t) = \frac{1}{2\hbar m} \int^t d\tau \left( \delta_{SQ}(\tau) - \frac{\rho_{SQ}(\tau)^2}{2} - \nu \right). \quad (3.78)$$

Enfin, les solutions de l'équation de Schrödinger (3.9) relatives à l'invariant semiquadratique(3.50) peuvent être écrites sous la forme (voir chapitre 2)

$$\begin{aligned} \psi_\nu(x, t) &= (\hbar^4 \eta_0)^{-\frac{1}{6}} e^{\frac{i}{2\hbar m} \int^t d\tau \left( \delta_{SQ}(\tau) - \frac{\rho_{SQ}(\tau)^2}{2} - \nu \right)} \times e^{-i \frac{\rho_{SQ}(t)x}{2\hbar}} \\ &\times Ai \left[ \left( \frac{\eta_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left( x + \frac{1}{\eta_0} \left( \delta_{SQ}(t) - \frac{\rho_{SQ}(t)^2}{4} + \nu \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Ces solutions forment bien sur un ensemble complet satisfaisant aux relations d'orthonormalisation et de fermeture. Chaque solution  $\psi_\nu(x, t)$  peut être considérée comme un paquet d'onde d'Airy se propageant le long de la trajectoire définie par

$$x_c^{(\nu)} = \frac{1}{\eta_0} \left( \frac{\rho_{SQ}(t)^2}{4} - \delta_{SQ} + \nu \right). \quad (3.80)$$

### 3.6 Invariant quadratique et ensemble complet de solutions correspondantes

Pour obtenir un invariant Hermitien qui soit à tout instant à la fois quadratique par rapport à l'opérateur impulsion et à l'opérateur position, nous choisissons les coefficients initiaux  $\alpha_0, \beta_0,$  et  $\gamma_0$  de telle sorte que

$$\alpha_0 \gamma_0 - \beta_0^2 = \omega^2 \eta_0. \quad (3.81)$$

Donc,  $\alpha_0$  et  $\gamma_0$  doivent être de même signe et sans perte de généralité nous les considérons strictement positifs,  $\alpha_0 \succ 0$  et  $\gamma_0 \succ 0$ , ce qui équivaut à dire que  $\alpha(t) \succ 0$  à tout instant. La valeur de  $\beta_0$  n'est pas importante a priori, pourvu que la relation (3.81) soit satisfaite. Nous admettrons aussi que  $\alpha(t)$  est une fonction sans dimension.

L'invariant sera dénoté par  $I_Q(t)$ , tel que

$$I_Q(t) = \alpha(t)p^2 + \beta(t)(xp + px) + \gamma_0 x^2 + \eta(t)x + \rho(t)p + \delta(t), \quad (3.82)$$

et les paramètres dépendants du temps sont donnés par les relations (3.17) et la contrainte (3.81).

### 3.6.1 Fonctions propres et valeurs propres de l'opérateur quadratique $I_Q(t)$

Afin de résoudre l'équation aux valeurs propres

$$I_Q(t)\phi_\mu(x, t) = \mu\phi_\mu(x, t), \quad (3.83)$$

nous allons procéder comme dans les sections 3.3.1 et 3.4.1. Ainsi, nous allons proposer une transformation unitaire qui doit ramener l'équation (3.83) en une équation indépendante du temps.

Considérons donc la transformation unitaire définie par

$$\phi_\mu(x, t) = U_Q(t)\bar{\phi}_\mu(x), \quad (3.84)$$

où  $\bar{\phi}_\mu(x)$  est une fonction indépendante du temps et  $U_Q^+(t) = U_Q^{-1}(t)$ .

En reportant (3.84) dans (3.83), il vient que

$$\bar{I}_Q\bar{\phi}_\mu(x) = \mu\bar{\phi}_\mu(x), \quad (3.85)$$

avec

$$\bar{I}_Q = U_Q^+(t)I_Q(t)U_Q(t). \quad (3.86)$$

Notre but est de choisir  $U_Q(t)$  de telle sorte que  $\bar{I}_Q$  soit réduit à un opérateur simple qui ne dépend pas explicitement du temps. Pour ce faire, considérons  $U_Q(t)$  sous la forme suivante

$$U_Q(t) = U_1(t)U_2(t)U_3(t), \quad (3.87)$$

avec

$$U_1(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}B(t)x^2\right), \quad (3.88a)$$

$$U_2(t) = \exp\left(\frac{iA_2(t)}{\hbar}x\right)\exp\left(\frac{iA_1(t)}{\hbar}p\right), \quad (3.88b)$$

$$U_3(t) = \exp\frac{iA_3(t)}{2\hbar}(xp + px). \quad (3.88c)$$

On peut montrer facilement que les opérateurs  $x$  et  $p$  se transforment sous l'action des opérateurs  $U_i(t)$  comme suit

$$U_1^+(t)xU_1(t) = x, \quad (3.89a)$$

$$U_1^+(t)pU_1(t) = p - 2B(t)x, \quad (3.89b)$$

$$U_2^+(t)xU_2(t) = x - A_1(t), \quad (3.89c)$$

$$U_2^+(t)pU_2(t) = p + A_2(t), \quad (3.89d)$$

$$U_3^+(t)xU_3(t) = x \exp(-A_3(t)), \quad (3.89e)$$

$$U_3^+(t)pU_3(t) = p \exp(A_3(t)). \quad (3.89f)$$

En utilisant les relations (3.89) dans (3.86), l'invariant transformé  $\bar{I}_Q$  sera donné par

$$\begin{aligned} \bar{I}_Q = & \alpha(t)e^{2A_3}p^2 + (\beta - 2\alpha B)(xp + px) + (\gamma + 4\alpha B^2 - 4\beta B)e^{-2A_3}x^2 \\ & + [(\eta - 2B\rho) + 2A_2(\beta - 2\alpha B) - 2A_1(4\alpha B^2 - 4\beta B + \gamma)]e^{-A_3}x \\ & + [\rho + 2\alpha A_2 - 2A_1(\beta - 2\alpha B)]e^{A_3}p + \alpha A_2^2 + A_1^2(4\alpha B^2 - 4\beta B + \gamma) \\ & - 2A_1A_2(\beta - 2\alpha B) - A_1(\eta - 2B\rho) + \rho A_2 + \delta. \end{aligned} \quad (3.90)$$

On voit que  $\bar{I}_Q$  semble plus compliqué que  $I_Q(t)$  mais il a l'avantage de dépendre de quatre paramètres libres,  $B(t)$ ,  $A_1(t)$ ,  $A_2(t)$  et  $A_3(t)$ , qui peuvent être ajustés de telle sorte à simplifier sa forme par l'élimination des termes non désirés. Tout d'abord fixons  $A_3(t)$  et  $B(t)$  par

$$A_3(t) = -\frac{1}{2} \ln \alpha(t), \quad (3.91a)$$

$$B(t) = \frac{\beta(t)}{2\alpha(t)}, \quad (3.91b)$$

et remarquons qu'ils sont bien définis à tout instant puisque la fonction  $\alpha(t)$  est toujours positive.

En reportant les relations (3.91) dans (3.90), le nouveau invariant  $\bar{I}_Q$  sera réduit à la forme suivante

$$\begin{aligned} \bar{I}_Q = & p^2 + (\alpha\gamma - \beta^2) x^2 + \sqrt{\alpha} \left[ \left( \eta - \frac{\beta}{\alpha} \rho \right) - 2A_1 \left( \gamma - \frac{\beta^2}{\alpha} \right) \right] x + \sqrt{\frac{1}{\alpha}} [\rho + 2\alpha A_2] p \\ & + \alpha A_2^2 + A_1^2 \left( \gamma - \frac{\beta^2}{\alpha} \right) - A_1 \left( \eta - \frac{\beta}{\alpha} \rho \right) + \rho A_2 + \delta. \end{aligned} \quad (3.92)$$

Fixons maintenant  $A_1(t)$  et  $A_2(t)$  de telle sorte que les coefficients de  $x$  et  $p$  dans (3.92) s'annulent identiquement. Ainsi, ils seront choisis sous la forme

$$A_1(t) = \frac{(\eta(t)\alpha(t) - \beta(t)\rho(t))}{2(\alpha(t)\gamma(t) - \beta^2(t))}, \quad (3.93a)$$

$$A_2(t) = -\frac{\rho(t)}{2\alpha(t)}. \quad (3.93b)$$

Avec le choix (3.93), l'invariant  $\bar{I}_Q$  se réduit finalement à une forme plus simple, donnée par

$$\bar{I}_Q = p^2 + \omega^2 x^2 + R(t), \quad (3.94)$$

avec

$$\omega^2 = \alpha(t)\gamma(t) - \beta^2(t), \quad (3.95)$$

et

$$R(t) = \delta - \frac{\frac{1}{\omega^2} (\eta\alpha - \beta\rho)^2 + \rho^2}{4\alpha}. \quad (3.96)$$

Cependant, en se servant des relations (3.16) ou (3.17), il est facile de constater que  $\omega^2$  et  $R$  sont des quantités constantes. En effet, en utilisant (3.17), on vérifie facilement en vertu de la contrainte (3.81), que

$$\omega^2 = \alpha_0\gamma_0 - \beta_0^2, \quad (3.97)$$

est une constante positive telle que  $[\omega] = \frac{M}{T}$ .

Tenant compte de (3.97), la dérivé de  $R$  par rapport au temps est donnée par

$$\dot{R} = \dot{\delta} + \frac{\dot{\alpha}}{4\alpha^2} \left[ \frac{1}{\omega^2} (\eta\alpha - \beta\rho)^2 + \rho^2 \right] - \frac{1}{2\alpha} \left[ \dot{\rho}\rho + \frac{1}{\omega^2} (\eta\alpha - \beta\rho) \left( \dot{\eta}\alpha + \eta\dot{\alpha} - \dot{\beta}\rho - \beta\dot{\rho} \right) \right]. \quad (3.98)$$

En utilisant les relations (3.16), on montre alors que

$$\dot{R} \equiv 0, \quad (3.99)$$

et par conséquent, on peut écrire

$$R(t) = R(0) = \delta_0 - \frac{(\eta_0 - \beta_0\rho_0)^2 + \omega^2\rho_0^2}{4\alpha_0\omega^2}. \quad (3.100)$$

Pour simplifier, et sans perte de généralisation, on choisira  $\delta_0$  tel que  $R(0) = 0$ , ce qui correspond à le fixer comme

$$\delta_0 = \frac{(\eta_0 - \beta_0\rho_0)^2 + \omega^2\rho_0^2}{4\alpha_0\omega^2}. \quad (3.101)$$

Par ailleurs, en tenant compte de (3.97) et utilisant les relations (3.17), il est aisé de voir que  $A_1(t)$ ; donné dans (3.93a) peut se mettre sous la forme

$$A_1(t) = \frac{(\beta_0\rho_0 - \eta_0\alpha_0)}{2\omega^2} + \frac{1}{m} \frac{(\beta_0\eta_0 - \rho_0\gamma_0)}{2\omega^2} t - \frac{f_2(t)}{m}, \quad (3.102)$$

et par conséquent, si on fixe les coefficients initiaux tels que

$$\frac{\beta_0\rho_0 - \eta_0\alpha_0}{2\omega^2} = x_c(t), \quad (3.103)$$

et

$$\frac{\beta_0\eta_0 - \rho_0\gamma_0}{2\omega^2} = p_c(t), \quad (3.104)$$

et compte tenu de (3.5), on voit bien que la fonction  $A_1(t)$  coïncide avec la position de la particule classique

$$A_1(t) = x_c(t). \quad (3.105)$$

En tenant compte de (3.97) et (3.101), on voit bien que  $\bar{I}_Q$  ne dépend pas explicitement du temps, et s'écrit sous la forme simple

$$\bar{I}_Q = p^2 + \omega^2 x^2, \quad (3.106)$$

qui ressemble donc, à une constante multiplicative près, à l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique de masse égale à 1.

Pour résoudre l'équation aux valeurs propres (3.85), on se propose de chercher des solutions  $\bar{\phi}_\mu(x)$  satisfaisant aux conditions aux limites  $\bar{\phi}_\mu(\pm\infty) = 0$  : Ainsi, les fonctions propres de  $\bar{I}_Q$  s'expriment en termes de la fonction de Gauss et des polynômes d'Hermite  $H_n$  sous la forme [4].

$$\bar{\phi}_\mu(x) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x \right), \quad (3.107)$$

et les valeurs propres correspondantes  $\mu$  sont discrètes et données par

$$\mu = \mu_n = (2n + 1) \hbar\omega \text{ avec } n \in \mathbb{N}. \quad (3.108)$$

Le facteur  $\sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$  est choisi de telle sorte que les  $\bar{\phi}_\mu(x)$  satisfèront les relations d'orthonormalisation et de fermeture

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \bar{\phi}_n^*(x) \bar{\phi}_m(x) = \delta_{nm}, \quad (3.109a)$$

$$\sum_{n \in \mathbb{N}} \bar{\phi}_n(x) \bar{\phi}_n(\dot{x}) = \delta(x - \dot{x}) \quad (3.109b)$$

Afin d'obtenir les fonctions propres de l'opérateur invariant (3.82), utilisons (3.84), tout en tenant compte de (3.87) et (3.88). En se servant des identités fondamentales suivantes

$$\exp\left[\frac{\alpha}{i\hbar}(xp_x + p_x x)\right] f(x) = e^{-\alpha} f(e^{-2\alpha}x), \quad (3.110)$$

et

$$\exp\left(\frac{\alpha}{i\hbar}p_x\right) f(x) = f(x - \alpha), \quad (3.111)$$

où  $f(x)$  est une fonction arbitraire mais infiniment dérivable, on obtient formellement

$$\phi_n(x, t) = e^{\frac{A_3(t)}{2}} \exp\frac{i}{\hbar}(A_2(t)x - B(t)x^2) \bar{\phi}_n(e^{A_3(t)}(x - A_1(t))). \quad (3.112)$$

En reportant (3.91) et (3.93) dans (3.112), la fonction  $\phi_n(x, t)$  peut être mise sous la forme explicite suivante [28] :

$$\begin{aligned} \phi_n(x, t) &= \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\alpha(t)\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{i}{2\alpha(t)\hbar}(\rho(t)x + \beta(t)x^2)} \exp\left[-\frac{\omega}{2\hbar\alpha(t)} \left(x + \frac{1}{2\omega^2}(\eta(t)\alpha(t) - \beta(t)\rho(t))\right)^2\right] \\ &\times H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\alpha(t)\hbar}} \left(x + \frac{1}{2\omega^2}(\eta(t)\alpha(t) - \beta(t)\rho(t))\right)\right). \end{aligned} \quad (3.113)$$

Ces solutions satisfont bien sur des relations d'orthonormalisation et de fermeture semblables aux relations (3.109) et par conséquent elles forment un ensemble complet de solutions.

Notons enfin que les valeurs propres  $\mu_n$  correspondantes ne sont pas dégénérées de sorte que  $I_Q(t)$  forme à lui seul un E.C.O.C.

### 3.6.2 Phases globales et solutions du type oscillateur harmonique

Dans ce cas aussi, et puisque les valeurs propres ne sont pas dégénérées, les phases globales peuvent être calculées aussi à partir de la relation (2.22), qui s'écrit ici comme

$$\hbar \dot{\theta}_n(t) \phi_n(x, t) = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \phi_n(x, t). \quad (3.114)$$

On peut procéder de la même manière que pour les solutions des invariants linéaire et semi-quadratique, c'est-à-dire en reportant (3.113) dans (3.114), effectuant les dérivations et utilisant les propriétés des polynômes d'Hermite. Pour éviter cette petite complication, nous procédons ici d'une manière différente qui nous permet d'éviter de faire appel aux propriétés des polynômes d'Hermite. En effet, en utilisant (3.84), on peut écrire (3.114) sous la forme équivalente

$$\hbar \dot{\theta}_n(t) \bar{\phi}_n(x) = \left( i\hbar U_Q^+(t) \frac{\partial U_Q(t)}{\partial t} - U_Q^+(t) H(t) U_Q(t) \right) \bar{\phi}_n(x). \quad (3.115)$$

Par ailleurs, en se servant des relations (3.89), on peut montrer que

$$\begin{aligned} i\hbar U_Q^+(t) \frac{\partial U_Q(t)}{\partial t} &= \dot{B}(t) e^{-2A_3(t)x^2} - \frac{\dot{A}_3(t)}{2} (xp + px) + \dot{A}_1(t) e^{A_3(t)p} \\ &\quad - \left( \dot{A}_2(t) - 2A_1(t) \dot{B}(t) \right) e^{-A_3(t)x} \\ &\quad + A_1^2(t) \dot{B}(t) - A_1(t) \dot{A}_2(t), \end{aligned} \quad (3.116)$$

et

$$\begin{aligned}
U_Q^+(t) H(t) U_Q(t) &= \frac{e^{2A_3(t)}}{2m} p^2 + \frac{2B^2(t) e^{-2A_3(t)}}{2m} x^2 + \frac{(A_2(t) - 2B(t) A_1(t))}{m} e^{A_3(t)} p \\
&\quad - \left( \frac{2B(t) (A_2(t) - 2B(t) A_1(t))}{m} - f(t) \right) e^{-A_3(t)} x \\
&\quad - \frac{B(t)}{m} (xp + px) + \frac{(A_2(t) - 2B(t) A_1(t))^2}{2m} + A_1(t) f(t)
\end{aligned} \tag{3.117}$$

En reportant (3.116) et (3.117) dans (3.115), on s'aperçoit aisément, d'après les résultats (3.91), (3.93), (3.95) et (3.16), que les coefficients de  $(xp + px)$ ;  $p$  et  $x$  dans (3.115) s'annulent identiquement, c'est-à-dire

$$-\frac{\dot{A}_3(t)}{2} + \frac{B(t)}{m} \equiv 0, \tag{3.118a}$$

$$-\dot{A}_1(t) + \frac{A_2(t) - 2B(t) A_1(t)}{m} \equiv 0, \tag{3.118b}$$

$$\frac{2B(t) (A_2(t) - 2B(t) A_1(t))}{m} - f(t) - \left( \dot{A}_2(t) - 2A_1(t) \dot{B}(t) \right) \equiv 0 \tag{3.118c}$$

La relation (3.115) se réduit alors à

$$\hbar \dot{\theta}_n(t) \bar{\phi}_n(x) = \left( \begin{array}{c} -\frac{1}{2m\alpha(t)} (p^2 + \omega^2 x^2) + A_1^2(t) \dot{B}(t) - A_1(t) \dot{A}_2(t) \\ -\frac{(A_2(t) - 2B(t) A_1(t))^2}{2m} - f(t) A_1(t) \end{array} \right) \bar{\phi}_n(x). \tag{3.119}$$

En se servant maintenant de (3.107), (3.108), (3.118) et (3.16), on obtient donc

$$\dot{\theta}_n(t) = -\frac{\omega}{m\alpha(t)} \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2\hbar} \left( \frac{d}{dt} (A_1(t) A_2(t)) + f(t) A_1(t) \right) - f(t) A_1(t), \tag{3.120}$$

qui s'écrit aussi sous la forme [28]

$$\dot{\theta}_n(t) = - \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega}{m\alpha(t)} + \frac{\omega^2 \rho^2(t) - (\eta(t)\alpha(t) - \beta(t)\rho(t))^2}{8m\hbar\alpha^2(t)\omega^2(t)}. \quad (3.121)$$

Les phases  $\theta_n(t)$  sont alors données par

$$\theta_n(t) = - \int^t d\tau \left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega}{m\alpha(\tau)} + \frac{1}{2\hbar} A_1(\tau) f(\tau) \right] - \frac{1}{2\hbar} \int^t d(A_1(\tau) A_2(\tau)). \quad (3.122)$$

Enfin, les solutions  $\psi_n(x, t)$  sont obtenues à partir de (3.112) et (3.122), à une constante de phase près, sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\frac{\omega}{\pi\alpha(t)\hbar}} \exp \left( -i \int^t d\tau \left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega}{m\alpha(\tau)} + \frac{1}{2\hbar} A_1(\tau) f(\tau) \right] \right) \\ &\times \exp \left( -\frac{i}{2\hbar} A_1(t) A_2(t) \right) \exp \left( \frac{i}{\hbar} (A_2(t)x - B(t)x^2) \right) \\ &\times \exp \left[ -\frac{\omega}{2\hbar\alpha(t)} (x - A_1(t))^2 \right] H_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{\hbar\alpha(t)}} (x - A_1(t)) \right), \end{aligned} \quad (3.123)$$

qui forment, bien sur, un ensemble complet de fonctions.

En tenant compte de (3.105), (3.2) et (3.118b), il est aisé d'en déduire que l'impulsion de la particule classique, donnée par (3.4) est reliée aux fonctions  $A_1(t)$ ,  $A_2(t)$  et  $B(t)$  par

$$p_c(t) = A_2(t) - 2A_1(t)B(t). \quad (3.124)$$

(voir aussi (3.131a) et (3.131b) dans la section suivante). Par conséquent, en éliminant  $A_1(t)$ ,  $A_2(t)$  et  $B(t)$  au profit de  $x_c(t)$  et  $p_c(t)$  dans (3.123), on peut exprimer  $\psi_n(x, t)$  en termes de  $x_c(t)$  et  $p_c(t)$  sous la forme suivante

$$\begin{aligned}
\psi_n(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt{\frac{\omega}{\pi \alpha(t) \hbar}} \exp \left( -i \int^t d\tau \left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{\omega}{m \alpha(\tau)} + \frac{1}{2\hbar} x_c(\tau) f(\tau) \right] \right) \\
&\times \exp \left( \frac{i}{\hbar} p_c(t) \left( x - \frac{x_c(t)}{2} \right) \right) \exp \left( -\frac{(\omega + i\beta(t))}{2\alpha(t) \hbar} (x - x_c(t))^2 \right) \\
&\times H_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{\hbar \alpha(t)}} (x - x_c(t)) \right), \tag{3.125}
\end{aligned}$$

qui coïncide bien avec celle donnée dans la référence [?].

### 3.6.3 Valeurs moyennes, écarts quadratiques moyens de la position et l'impulsion de la particule et relations d'incertitudes

#### Valeurs moyennes et écarts quadratiques moyens

Si l'on note la valeur moyenne d'une observable  $O$  dans un état  $|\psi\rangle$  par

$$\langle O \rangle_\psi = \langle \psi | O | \psi \rangle, \tag{3.126}$$

on peut alors écrire les valeurs moyennes de  $x^l$  et  $p^l$  dans l'état  $|\psi_n(t)\rangle$  comme

$$\langle x^l \rangle_{\psi_n(t)} = \langle \psi_n(t) | x^l | \psi_n(t) \rangle = \langle \bar{\phi}_n | (U_Q^+(t) x U_Q(t))^l | \bar{\phi}_n \rangle, \tag{3.127a}$$

$$\langle p^l \rangle_{\psi_n(t)} = \langle \psi_n(t) | p^l | \psi_n(t) \rangle = \langle \bar{\phi}_n | (U_Q^+(t) p U_Q(t))^l | \bar{\phi}_n \rangle, \tag{3.127b}$$

où l'on a utilisé (3.84) et sachant que les facteurs de phases s'éliminent.

En se servant des relations (3.89), on obtient les valeurs moyennes des opérateurs position et impulsion sous la forme

$$\langle x \rangle_{\psi_n(t)} = e^{-A_3(t)} \langle x \rangle_{\bar{\phi}_n} + A_1(t), \tag{3.128a}$$

$$\langle p \rangle_{\psi_n(t)} = e^{A_3(t)} \langle p \rangle_{\bar{\phi}_n} - 2B(t) e^{-A_3(t)} \langle x \rangle_{\bar{\phi}_n} + A_2(t) - 2A_1(t) B(t). \tag{3.128b}$$

Un calcul similaire permet de mettre les valeurs moyennes des carrés des opérateurs position et impulsion sous la forme

$$\langle x^2 \rangle_{\psi_n(t)} = e^{-2A_3(t)} \langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + 2A_1(t) e^{-A_3(t)} \langle x \rangle_{\bar{\phi}_n} + A_1^2(t), \quad (3.129a)$$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle_{\psi_n(t)} &= e^{2A_3(t)} \langle p^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + 4B^2(t) e^{-2A_3(t)} \langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + (A_2(t) - 2A_1(t) B(t))^2 \\ &\quad - 2B(t) \langle xp + px \rangle_{\bar{\phi}_n} + 2(A_2(t) - 2A_1(t) B(t)) e^{A_3(t)} \langle p \rangle_{\bar{\phi}_n} \\ &\quad - 4B(t) (A_2(t) - 2A_1(t) B(t)) e^{-A_3(t)} \langle x \rangle_{\bar{\phi}_n}. \end{aligned} \quad (3.129b)$$

Cependant, par un calcul direct, en utilisant les propriétés des polynômes d'Hermite, on s'aperçoit aisément que

$$\langle x \rangle_{\bar{\phi}_n} = \langle p \rangle_{\bar{\phi}_n} = \langle xp + px \rangle_{\bar{\phi}_n} = 0, \quad (3.130a)$$

$$\langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} = \frac{\hbar}{\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.130b)$$

$$\langle p^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.130c)$$

Par conséquent, les valeurs moyennes des opérateurs position et impulsion, coïncidant avec la position et l'impulsion de la particule classique (3.5) et (3.4), sont données par

$$\langle x \rangle_{\psi_n(t)} = A_1(t) = x_c(t), \quad (3.131a)$$

$$\langle p \rangle_{\psi_n(t)} = A_2(t) - 2A_1(t) B(t) = p_c(t), \quad (3.131b)$$

qui sont bien sûr indépendants de  $n$  : Les valeurs moyennes des carrés des opérateurs position et impulsion s'expriment par

$$\langle x^2 \rangle_{\psi_n(t)} = e^{-2A_3(t)} \langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + A_1^2(t), \quad (3.132a)$$

$$\langle p^2 \rangle_{\psi_n(t)} = e^{2A_3(t)} \langle p^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + 4B^2(t) e^{-2A_3(t)} \langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + (A_2(t) - 2A_1(t) B(t))^2 - 2B(t) \langle xp + px \rangle_{\bar{\phi}_n} + 2(A_2(t) - 2A_1(t) B(t)) e^{A_3(t)} \langle p \rangle_{\bar{\phi}_n} - 4B(t) (A_2(t) - 2A_1(t) B(t)) e^{-A_3(t)} \langle x \rangle_{\bar{\phi}_n}. \quad (3.132b)$$

Par conséquent, en utilisant (3.132), (3.131), (3.130a), (3.130b) et (3.91), on obtient les écarts quadratiques moyens de la position et l'impulsion sous la forme

$$\begin{aligned} (\Delta x)_{\psi_n(t)}^2 &= \langle x^2 \rangle_{\psi_n(t)} - \langle x \rangle_{\psi_n(t)}^2 = e^{-2A_3(t)} \langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} \\ &= \frac{\hbar\alpha(t)}{\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (3.133)$$

et

$$\begin{aligned} (\Delta p)_{\psi_n(t)}^2 &= \langle p^2 \rangle_{\psi_n(t)} - \langle p \rangle_{\psi_n(t)}^2 = e^{2A_3(t)} \langle p^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} + 4B^2(t) e^{-2A_3(t)} \langle x^2 \rangle_{\bar{\phi}_n} \\ &= \frac{\hbar\gamma_0}{\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.134)$$

On constate donc que l'écart quadratique moyen de l'impulsion est une constante pendant que celui de la position est une fonction du temps. Tous les deux croissent avec  $n$  et dépendent seulement des paramètres  $\alpha_0$ ,  $\beta_0$  et  $\gamma_0$  qui caractérisent l'état initial du système et ne dépendent pas de la force extérieure  $f(t)$ .

**Relations d'incertitudes** A partir des relations (3.133) et (3.134), on obtient les incertitudes sur la position et l'impulsion dans l'état  $|\psi_n(t)\rangle$ , qui seront données par

$$(\Delta x)_{\psi_n(t)} = \sqrt{\frac{\hbar\alpha(t)}{\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right)}, \quad (3.135a)$$

$$(\Delta p)_{\psi_n(t)} = \sqrt{\frac{\hbar\gamma_0}{\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right)}, \quad (3.135b)$$

de sorte que leur produit est donné par

$$\begin{aligned}
(\Delta x \Delta p)_{\psi_n(t)} &= \frac{\hbar}{\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\gamma_0 \alpha} \\
&= \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{1 + \left( \frac{\beta(t)}{\omega} \right)^2}.
\end{aligned} \tag{3.136}$$

On constate donc, d'après (3.136) que le principe de Heisenberg est toujours satisfait

$$(\Delta x \Delta p)_{\psi_n(t)} \succeq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.137}$$

Pour  $-\sqrt{\gamma_0 \alpha_0} \prec \beta_0 \preceq 0$ , on constate qu'à  $t = 0$ , c'est-à-dire dans l'état initial  $|\psi_n(0)\rangle$ , le produit d'incertitudes  $(\Delta x \Delta p)_{\psi_n(t)}$  atteint sa valeur inférieure

$$(\Delta x \Delta p)_{\psi_n(t)} = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{\gamma_0 \alpha_0}{\gamma_0 \alpha_0 - \beta_0^2}}, \tag{3.138}$$

et au fur et à mesure que le système évolue, il croit indéfiniment.

Par ailleurs, pour  $\sqrt{\gamma_0 \alpha_0} \succ \beta_0 \succ 0$ ,  $(\Delta x \Delta p)_{\psi_n(t)}$  atteint son minimum à l'instant  $t = \frac{m\beta_0}{\gamma_0}$ .

$$(\Delta x \Delta p)_{\psi_n(t)} = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \tag{3.139}$$

et ensuite il croit indéfiniment.

### 3.7 Relations entre les différentes solutions obtenues

Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre 2, relation (2.36), on peut toujours trouver une solution générale de l'équation de Schrödinger comme superposition des solutions correspondant à un invariant. En particulier, on peut choisir la nouvelle solution comme faisant partie de l'ensemble de solutions d'un autre invariant. Les coefficients de la superposition peuvent alors être calculés à partir de la relation (2.25).

En résumé, on peut écrire

$$\psi_{\xi}^{(K)}(x, t) = \int d\eta g_{\xi}(\eta) \psi_{\eta}^{(J)}(x, t), \quad (3.140)$$

où  $\{\psi_{\eta}^{(J)}(x, t)\}$  et  $\{\psi_{\xi}^{(K)}(x, t)\}$  sont respectivement deux ensembles de solutions de l'équation de Schrödinger correspondant respectivement à deux opérateurs invariants  $I_J$  et  $I_K$  : La fonction  $g_{\xi}(\eta)$  sera alors obtenue sous la forme

$$g_{\xi}(\eta) = \int dx \psi_{\eta}^{*(J)}(x, 0) \psi_{\xi}^{(K)}(x, 0). \quad (3.141)$$

Il est évident que les  $g_{\xi}(\eta)$  forment un ensemble de fonctions orthogonales

$$\int d\eta g_{\xi}^*(\eta) g_{\xi}(\eta) = \delta_{\xi, \xi}. \quad (3.142)$$

En particulier, on peut trouver les fonctions  $g_{\xi}(\eta)$  qui font passer des solutions en ondes planes (3.48), caractérisant l'invariant linéaire (3.20), avec  $\eta_0 = 0$ , aux solutions d'Airy (3.79) et de type oscillateur harmonique (3.123) caractérisant respectivement les opérateurs invariants semi-quadratique (3.50) et quadratique (3.82).

### 3.7.1 Relation entre les solutions simples de $I_L$ et celles de $I_{SQ}$

En mettant  $t = 0$  dans (3.48) et (3.79), on obtient les solutions simples de l'invariant linéaire (pour  $\eta_0 = 0$ ) à l'instant initial sous la forme

$$\psi_{\lambda}(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\lambda x\right], \quad (3.143)$$

et celles correspondant à l'invariant semi-quadratique sous la forme

$$\psi_{\nu}(x, 0) = (\hbar^4 \eta_0)^{-\frac{1}{6}} \exp\left(-i\frac{\rho_0 x}{2\hbar}\right) Ai\left[\left(\frac{\eta_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(x - \frac{1}{\eta_0} \left(\frac{\rho_0^2}{4} + \nu\right)\right)\right]. \quad (3.144)$$

En reportant maintenant  $\psi_{\lambda}^*(x, 0)$  et  $\psi_{\nu}(x, 0)$  dans (3.141) à la place de  $\psi_{\eta}^{*(J)}(x, 0)$  et  $\psi_{\xi}^{(K)}(x, 0)$  respectivement, on obtient la fonction  $g_{\nu}(\eta)$ , qui fait passer des états corres-

pondant à l'invariant linéaire à celles correspondant à l'invariant semi-quadratique, sous la forme

$$g_\nu(\lambda) = \frac{(\hbar^4 \eta_0)^{-\frac{1}{6}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar}(\lambda + \frac{\rho_0}{2})x} Ai \left[ \left( \frac{\eta_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left( x - \frac{1}{\eta_0} \left( \frac{\rho_0^2}{4} + \nu \right) \right) \right], \quad (3.145)$$

qui se présente comme la transformation de Fourier d'une fonction d'Airy. En remplaçant la fonction d'Airy dans (3.145) par sa forme intégrale selon (3.68) et faisant quelques changements de variables, on obtient

$$g_\nu(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar\eta_0}} \exp \frac{i}{\hbar\eta_0} \left[ \frac{\lambda^3}{3} + \frac{\rho_0}{2} \lambda^2 - \left( \frac{\rho_0}{2} + \lambda \right) \nu - \frac{\rho_0^3}{12} \right]. \quad (3.146)$$

Il est clair que les  $g_\nu(\lambda)$  sont orthogonales. En effet

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_\nu(\lambda) g_{\nu'}(\lambda) d\lambda = \frac{e^{-\frac{\rho_0}{2\hbar}}}{2\pi\hbar\eta_0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda e^{\frac{-i\lambda}{\hbar\eta_0}(\nu - \nu')} = \delta(\nu - \nu'). \quad (3.147)$$

### 3.7.2 Relation entre les solutions simple de $I_L$ et celles de $I_Q$

En mettant  $t = 0$  dans (3.123), on obtient les solutions correspondant à l'invariant quadratique à l'instant initial sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi \alpha \alpha_0 \hbar}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} (A_2(0)x - B(0)x^2) \right) \\ &\times \exp \left[ -\frac{\omega}{2\hbar\alpha_0} (x - A_1(0))^2 \right] H_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{\hbar\alpha_0}} (x - A_1(0)) \right). \end{aligned} \quad (3.148)$$

En reportant maintenant  $\psi_\lambda^*(x, 0)$  et  $\psi_\nu(x, 0)$  dans (3.141) à la place de  $\psi_\eta^{*(J)}(x, 0)$  et  $\psi_\xi^{(K)}(x, 0)$  respectivement, on obtient la fonction  $g_n(\lambda)$ , qui fait passer des états correspondant à l'invariant linéaire à celles correspondant à l'invariant quadratique, sous la forme

$$g_n(\lambda) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi \hbar \gamma_0}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \int dx e^{\frac{-i}{\hbar}(\lambda - A_2(0))} e^{-\frac{B(0)}{\hbar} x^2} \times \exp \left[ -\frac{\omega}{2\hbar \alpha_0} (x - A_1(0))^2 \right] H_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{\hbar \alpha_0}} (x - A_1(0)) \right), \quad (3.149)$$

qui se présente comme la transformation de Fourier du produit d'une fonction Gaussienne complexe par une fonction du type oscillateur harmonique. Après un calcul direct et laborieux, on obtient

$$g_n(\lambda) = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi \hbar \gamma_0}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{\frac{i}{2\hbar \gamma_0} (\eta_0 \lambda + \beta_0 \lambda^2)} e^{-\frac{\omega}{2\hbar \gamma_0} \left( \lambda + \frac{1}{2\omega^2} (\rho_0 \gamma_0 - \eta_0 \beta_0) \right)^2} \times H_n \left( \sqrt{\frac{\omega}{\hbar \gamma_0}} \left( \lambda + \frac{1}{2\omega^2} (\rho_0 \gamma_0 - \eta_0 \beta_0) \right) \right). \quad (3.150)$$

Les  $g_n(\lambda)$  sont bien sur des fonctions orthogonales. En effet en faisant le changement de variable

$$\sqrt{\frac{\omega}{\hbar \gamma_0}} \left( \lambda + \frac{1}{2\omega^2} (\rho_0 \gamma_0 - \eta_0 \beta_0) \right) = z, \quad (3.151)$$

on obtient

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g_n^*(\lambda) g_m(\lambda) d\lambda = \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{z^2}{2}} H_n(z) H_m(z) dz = \delta_{nm}. \quad (3.152)$$

De la même manière, on montre qu'il est possible obtenir les solutions de l'invariant quadratique à partir de celles de l'invariant semi-quadratique et vice-versa. En conclusion, nous pouvons dire que les solutions correspondantes à deux invariants linéairement indépendants peuvent être reliées par des superpositions appropriées.

## 3.8 conclusion

Dans ce chapitre, nous avons obtenu différentes solutions pour l'équation de Schrödinger à une dimension associée à une particule de masse constante, placée dans un champ de force uniforme dans l'espace et dépendant du temps. Partant d'un opérateur invariant général, nous avons montré par une étude systématique qu'il est possible de construire trois invariants linéairement indépendants à partir desquels découlent trois ensembles complets de solutions pour l'équation de Schrödinger du problème. Nous avons ainsi présenté d'une manière unifiée toutes les solutions exactes, connues dans la littérature. Nous avons présenté pour la première fois des solutions correspondant à un invariant linéaire sous forme de produit d'une onde plane par une fonction Gaussienne complexes. Les solutions du type onde plane, déjà connues dans la littérature, sont alors déduites comme cas limite.

Nous avons aussi introduit pour la première fois l'invariant semi-quadratique et obtenu l'ensemble des solutions correspondantes sous forme de paquets d'ondes d'Airy. Même si des formes particulières de solutions sous forme de fonction d'Airy sont déjà connues dans la littérature, elles ont été obtenues comme superposition d'autres solutions mais non pas à partir d'un opérateur invariant.

Concernant l'invariant quadratique, nous avons exposé une étude profonde. En particulier nous avons montré que les paramètres initiaux de l'invariant doivent être choisis de telle sorte qu'ils vérifient une certaine contrainte. Seulement ce choix qui correspond à des solutions physiquement acceptables pour l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien de la particule. Les autres choix présentés dans la littérature ne sont pas acceptables à cause du fait que les solutions qui en découlent ne gardent pas la même forme au cours du temps. Nous avons alors exposé les solutions physiques qui sont du type oscillateur harmonique et forment un ensemble complet. Par la suite, nous avons calculé les incertitudes sur la position et l'impulsion de la particule dans un état donné et discuté leur produit. En particulier, nous avons montré que les incertitudes ne dépendent pas de la force extérieure et que le principe de Heisenberg est bien satisfait.

Enfin, nous avons montré comment qu'il est possible de relier les différentes solutions, que nous avons obtenues, entre elles par des superpositions appropriées.

# Conclusion

Nous avons présenté dans cette thèse un travail théorique qui consiste en la résolution de l'équation de Schrödinger pour un problème de mécanique quantique non stationnaire qui est bien connu dans la littérature, cependant la démarche utilisée ainsi que les résultats obtenus sont tout à fait nouveaux. En effet, contrairement à ce qui se fait dans la littérature, notre démarche consiste à utiliser la méthode des invariants conjointement avec les transformations unitaires sans faire appel aux transformations canoniques. Par conséquent, dans toutes les étapes de calcul le problème est abordé toujours du point de vue quantique.

Dans ce problème, relatif à une particule de masse constante et placée dans un potentiel linéaire dépendant du temps, nous avons montré qu'il est possible de définir trois opérateurs invariants linéairement indépendants. Le plus simple est un opérateur linéaire par rapport aux opérateurs position et impulsion de la particule et qui conduit à un ensemble de solutions du type onde plane multipliée par une fonction de Gauss complexe. Ce résultat général n'a pas été rapporté dans la littérature et se réduit, dans un cas limite, à ceux connus précédemment. Le second opérateur invariant est semi quadratique, dans le sens qu'il est quadratique par rapport à l'impulsion et linéaire par rapport à la position. Nous avons utilisé pour la première fois cet invariant qui conduit à des solutions du type paquet d'onde d'Airy. Le troisième opérateur invariant est quadratique à la fois par rapport à la position et l'impulsion. Nous avons systématiquement résolu l'équation aux valeurs propres correspondante. Les solutions de l'équation de Schrödinger qui découlent de cet invariant sont du type oscillateur harmonique satisfaisant au principe d'incertitude de Heisenberg. Nous avons montré que ces solutions coïncident avec celles obtenues dans la littérature. Ce travail est corroboré par une section où nous avons montré que les différentes solutions trouvées peuvent être obtenues les unes des autres par des superpositions appropriées.

En ce qui concerne nos perspectives dans ce domaine, elles sont nombreuses mais nous citons seulement celles que nous allons aborder dans un proche avenir.

Il reste à savoir comment retrouver les différentes solutions obtenues à partir de l'opérateur d'évolution. Aussi, nous voulons savoir comment obtenir l'opérateur invariant d'un ensemble de solutions qu'on obtient par superposition des solutions d'un autre invariant

connu. Il y a aussi la question des solutions correspondantes à des opérateurs d'ordres supérieurs. Par exemple, sachant que l'opérateur  $I = I_L I_{SQ} + I_{SQ} I_L$  est un invariant Hermitien pour l'Hamiltonien (3.1), est-il possible de construire les solutions correspondantes à partir de celles relatives à  $I_L$  et  $I_{SQ}$  ?

# Bibliographie

- [1] R. L. LIBOFF, *Introductory Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Canada, (1980).
- [2] L. I . SCHIFF, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, (1968).
- [3] L. D. LANDAU, E. LIFCHIZ, *Mécanique quantique*, Editions Mir, Moscou, (1973).
- [4] C. C. TANNOUJJI, B. DIU, F. LALOE, *Mécanique quantique T1*, Hermann, Paris, (1977).
- [5] H. R. LEWIS, JR, Phys. Rev. Letters 18, 510, 636 (1967).
- [6] H. R. LEWIS, JR, J. Math. Phys. 9, 1976 (1968).
- [7] H. R. LEWIS AND W. B RIESENFELD, J. Math. Phys. 10. 1458 (1969).
- [8] M. WAGNER, *Unitary Transformations in solid-state physics*, Elsevier, New York, (1986).
- [9] W. GREINER, *Mécanique quantique Une introduction*, Springer, Berlin, (1999).
- [10] E. SCHRÖDINGER, Phys. Rev. 28(1926).
- [11] W. T. SCOTT, E. SCHRÖDINGER, *An Introduction to his Writings*, The university of Massachusetts,Massachusetts, (1967).
- [12] L. MARCHILDON, *Mécanique quantique*, De Boeck & Larciens, Bruxelles, (2000).
- [13] A. SHAPERRE, F. WILCZEK, *Geometric Phases in Physics*, World Scientific, Singapore, (1989).
- [14] M. V. BERRY, Proc. R. Soc. A 392, 45 (1984).
- [15] G.DATTOLI, M.RICHETTA, G.SHETTINI AND A.TORRE, J. Math. Phys. 31, 2856 (1990).
- [16] D.C.KHANDEKAR, S.V.LAWANDE,K.V.BHAGWAT, *Path-Integral Methods and their Applications*, World Scientific Publishing, Singapore, (1993).

- [17] S. S. MIZRAHI, Phys. Lett A 138. 465 (1989).
- [18] I. GUEDES, Phys. Rev. A. 63, 034101 (2001).
- [19] M. FENG, Phys. Rev. A. 64, 034101 (2001).
- [20] D. Y. SONG, Europhys. Lett. 62, 622 (2003).
- [21] J. BAUER, Phys. Rev. A 65, 036101 (2002).
- [22] H. BEKKAR, F. BENAMIRA AND M. MAAMACHE, Phys. Rev. A. 68, 0160101 (2003).
- [23] P. G. LUAN, C-S. TANG, Phys. Rev. A. 71, 014101 (2005).
- [24] J. DUNKEL AND S. A. TRIGGER, Phys. Rev. A. 71, 052102 (2005).
- [25] G. LU, W. HAI AND L. CAI, Phys. Lett. A. 357, 181 (2006).
- [26] S. P. KIM, J. KOREAN PHYS. Soc. 44, 464 (2006).
- [27] L. KRACHE, M. MAAMACHE, Y. SAADI AND A. BENIAICHE, Chin. Phys. Lett. 26.7,070307 (2009).
- [28] M. BERREHAIL, F. BENAMIRE, Indian. J. Phys. 87 (2013).
- [29] J. D. JACKSON, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons Ltd. (1962).
- [30] R. DANDROFF, *Mecanique analytique*, Editions Publibook (2005).
- [31] V. OLIVIER, S. MANUEL, *Airy Functions and Applications to Physics*, World Scientific, London (2004).