

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

N° d'ordre :99/D3C/2018

Série :08/Phy/2018

THESE

Présentée pour l'obtention du diplôme de
DOCTORAT DE 3^{ème} CYCLE (LMD)

Spécialité : Physique

Option : Physique Théorique

Thème

Les états cohérents de la particule libre

Par

Khatir Abderrezak

Soutenue le 04 / 10 / 2018

Devant le Jury :

Président : A. Bachkhaznadjji Prof. Univ-Frères Mentouri constantine 1

Rapporteur : M. Maamache Prof. Univ-Ferhat Abbas sétif 1

Examineurs : B.Bentag Prof. Univ-Frères Mentouri constantine 1

N.Baadji MCA. Univ- Mohamed Boudiaf M'silla

REMERCIEMENTS

Je remercie Dieu tout puissant clément et miséricordieux pour m'avoir donné la force et la patience de mener à terme ce travail.

Cette thèse est l'aboutissement d'un travail effectué au Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes dynamiques de l'Université Ferhat Abbas Sétif 1 entre novembre 2014 et octobre 2017. Au cours de ces de trois années, j'ai eu le plaisir de faire la connaissance de nombreuses personnes qui ont, de manières diverses, contribué à la réussite de cette entreprise, et je tiens à leur exprimer ici mes plus vifs remerciements.

Tout d'abord, je remercie très chaleureusement mon directeur de thèse, Monsieur Mustapha Maamache qui a dirigé cette thèse à Sétif avec disponibilité et attention. Ses remarques et ses conseils m'ont permis d'obtenir les résultats contenus dans cette thèse.

Je remercie également Monsieur Halim Lakehal dont les discussions que nous avons eues m'ont beaucoup aidée à progresser dans mes travaux de recherche.

Merci également à Monsieur Yacine Bouguerra pour ses conseils et de m'avoir fait partager son expérience.

Monsieur le Professeur Addelmalik Bachkhaznadjji me fait l'honneur de présider le jury de ma thèse de doctorat, malgré ses occupations administratives, je lui exprime ma plus grande reconnaissance ainsi que mes plus vifs remerciement.

Je souhaite remercier Madame le Professeur Baya Bentag pour l'intérêt témoigné pour mon travail et pour avoir acceptée de participer au jury.

Monsieur Nadjib Baadji m'a accueilli à l'université de M'Silla durant un semestre et a accepté de faire partie de mon jury de soutenance qu'il en soit remercié.

Merci à Lamri Sarra, Yosra Redjati, Koussa Walid, Mana Naima, Cheniti Sara mes camarades doctorants, ces années de thèse ont été agréables à l'intérieur du laboratoire grâce à vous !

Table des matières

Introduction	6
1 Description quantique d'un système physique	8
1.1 Les postulats de la mécanique quantique	9
1.2 L'équation de Schrödinger	10
1.3 Les inégalités de Heisenberg	14
1.4 Description quantique d'une particule libre	15
1.4.1 Paquet d'ondes Gaussien	16
1.4.2 Evolution temporelle du paquet d'onde	17
2 Théorie des invariants	19
2.1 Bref Rappel sur l'oscillateur harmonique	19
2.2 Solution de L'équation de Schrödinger dépendante du temps	20
2.3 Choix de l'invariant	23
3 Les états cohérents	27
3.1 Les états cohérents de l'oscillateur harmonique	27
3.1.1 Propriétés des états cohérents	30
3.2 Evolution temporelle des états cohérents	31
4 Les états cohérents de la particule libre : Point de Vue de Bagrov et al	33
4.1 Invariant linéaire pour une particule libre	33
4.2 Les états cohérents généralisés dépendent du temps	36
4.3 Relations d'incertitude de Heisenberg	38

4.4	Les états cohérents généralisés semi-classique d'une particule libre :	39
5	Les états cohérents généralisés d'une particule libre : invariant hermitique	41
5.1	Dérivation d'un invariant linéaire hermitique	41
5.2	Solution générale localisée	43
5.3	Analyse quantique du système	43
	Conclusion	49
	Bibliographie	50
	Annexe : Article	53

Introduction

la mécanique quantique est une théorie très ambitieuse : qui prédit (ou au moins expliquer) tous les comportements de la matière à partir de ses constituants élémentaires (et par la même occasion chercher ce que sont ces constituants). En fait, le but est, en partant des noyaux et des électrons, à trouver des équations qui permettent, au moins dans le principe, des prédictions sur le monde qui nous entoure (au niveau terrestre). Il se trouve qu'à petite échelle, le monde n'est pas comme le nôtre. Les particules doivent être décrites par des ondes et non des points matériels. Toutefois, la description par des trajectoires est valable à titre d'approximation quand la longueur d'onde devient très petite devant les dimensions spatiales de ce qu'on cherche à mesurer. Ici la longueur d'onde associée à une particule de quantité de mouvement $p = mv$ est donnée par la relation de de Broglie : $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$. Donc quand les dimensions des objets à mesurer deviennent de l'ordre de λ , on ne peut plus appliquer la mécanique classique.

Après quelques tentatives, les physiciens sont arrivés à la conclusion que pour bien décrire la physique d'une particule à des échelles de longueur de l'ordre de λ , il fallait introduire une nouvelle fonction, appelée fonction d'onde, notée en général $\Psi(\mathbf{x})$ dont les valeurs sont complexes et qui a la propriété que $|\Psi(\mathbf{x})|^2 = \mathcal{P}(\mathbf{x})$, la densité de probabilité. Nous verrons dans les chapitres suivants l'équation qui décrit comment la fonction d'onde se transforme au cours du temps. On a donc une fonction $\Psi(\mathbf{x})$ pour chaque valeur du temps t . On définit donc une fonction $\Psi(\mathbf{x}, t)$ qui vérifie l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1)$$

où $\hbar = h/2\pi$, Δ est le laplacien et $V(\mathbf{x})$ est l'énergie potentielle de la particule (qui pourrait dépendre aussi du temps d'ailleurs). On peut faire une constatation très importante en regardant l'équation de Schrödinger, c'est qu'elle est linéaire. Ceci permet d'essayer d'écrire la solution générale sous la forme d'une combinaison linéaire de solutions ayant certaines propriétés qui simplifient l'équation.

Pour une particule libre, on a $V(\mathbf{x}) = 0$ et l'équation s'écrit

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (2)$$

On peut en particulier constater qu'il n'y a aucun moyen d'obtenir une fonction normalisable à partir de l'équation stationnaire. Toutefois, on constate que formellement, une solution sous la forme d'une onde plane $\Psi(\mathbf{x}, t) = C e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} - \omega t)}$ satisfait à l'équation pourvu que $\hbar\omega = \frac{(\hbar k)^2}{2m}$. Comme dit plus haut, cette solution n'est pas normalisable (l'intégrale du module au carré sur tout l'espace est infinie, quoiqu'on fasse!). Mais on peut faire des superpositions linéaires de ces fonctions d'onde qui sont normalisables. Ce sont les paquets d'onde. Le but de cette thèse est de construire paquets d'onde Gaussien qui reproduisent le mouvement classique pour la particule libre.

A cet effet, le premier chapitre introduit un rappel des postulats qui sont à la base de l'élaboration de la mécanique quantique, puis rappelle brièvement la mécanique quantique de la particule libre ainsi que les solutions normalisables associées.

Le deuxième chapitre développe la théorie des invariants en mécanique quantique et établit le lien entre les fonctions propres de ces invariants et la solution de l'équation de Schrödinger. Comme applications de cette théorie nous traitons l'oscillateur harmonique avec fréquence variable de deux manières différentes.

Le troisième chapitre s'intéresse aux états cohérents de l'oscillateur harmonique, leurs propriétés et leurs évolutions au cours du temps.

Le quatrième chapitre reprend en détail le travail de Bagrov et al (**V. G. Bagrov, D. M. Gitman, and A. S. Pereira, Phys.-Usp. 57, (2014) 891.**)

Le cinquième chapitre constitue le coeur de cette thèse où l'on construit les états cohérents associés à la particule libre. Pour cela, on postule l'invariant linéaire Hermétique de ce système puis on résout l'équation aux valeurs propres associée à cet invariant. Après le calcul de la phase on déduit la solution générale sous forme d'un paquet d'onde Gaussien qui aussi être généré à l'aide de l'action de l'opérateur unitaire de déplacement $D(\alpha, t)$ sur le vide.

Une conclusion couronne ce travail.

Chapitre 1

Description quantique d'un système physique

La physique est la science qui s'intéresse à expliquer, prévoir et quantifier les phénomènes fondamentaux qui nous entoure de façon la plus exacte possible. Elle modélise ce qu'on observe par des équations mathématiques et discute leurs solutions dans le but de construire la théorie qui décrit leur comportement.

Cette science se décompose en deux parties ; classique et quantique, où la première comprend trois branches principales « la mécanique newtonienne, l'électromagnétisme et thermodynamique / physique statistique ». On sait que la physique classique est complètement incapable d'expliquer les phénomènes à l'échelle microscopique, de ce fait les physiciens ont été obligés de développer une nouvelle théorie, pour exprimer les phénomènes à l'échelle microscopique, que l'on appelle physique quantique.

Historiquement, vers la fin du 19^{ème} siècle certains faits expérimentaux se révèlent être inexplicables par la physique classique, c'est le début de la physique quantique. Par exemple, le fameux problème du rayonnement du corps noir où l'émission et l'absorption d'énergie se fait d'une manière discontinue, ce qui est inexplicable du point de vue classique. L'étude de rayonnement du corps noir permet à Planck en 1900 de proposer la quantification d'énergie [1, 2], il suggéra que les énergies permises ne pouvaient être que des multiples entiers n d'une quantité proportionnelle à sa fréquence, ce coefficient étant sa fameuse constante h ($E_n = nh\nu$ où $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ constante fondamentale dite constante de Planck).

L'introduction de la constante universelle de Planck h et la quantification de l'énergie ont donné naissance à une nouvelle Physique. Quelque année plus tard, Albert Einstein a été le premier à utiliser les résultats de Planck en imaginant la lumière comme constituée de "grains" d'énergie $h\nu$, ce qui lui permis d'expliquer l'effet photoélectrique [1]. Mais la conséquence majeure de cette idée révolutionnaire de quantification de l'énergie est le développement de la mécanique quantique par Heisenberg et Schrödinger dans les années 1920. Ceci a permis une nouvelle description de l'état atomique. Après la découverte des photons, l'étude des spectres d'absorption et d'émission atomique permet à Bohr-Sommerfeld d'émettre l'hypothèse suivante : l'absorption ou l'émission de la lumière par l'atome ou la molécule ne se fait que pour des fréquences bien précise $\nu_{if} = \frac{|E_i - E_f|}{h}$ [2]. En 1923 Louis de Broglie a montré que les particules matérielles tout comme les photons, peuvent avoir un aspect ondulatoires. Cette fameuse idée de Louis de Broglie est d'associé à la quantité de mouvement \mathbf{p} d'une particule une longueur d'onde $\lambda = \frac{c}{\nu}$, appelée longueur d'onde de de Broglie. Une onde, dont la fréquence angulaire $\omega = 2\pi\nu$ et le vecteur d'onde \mathbf{k} , est donnée par les mêmes relations d'un photon [1, 2]

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = C e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)}, \quad (1.1)$$

où $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$, $E = \hbar\omega$ et C est l'amplitude de la fonction d'onde (1.1). Donc, on peut écrire la formule (1.1) sous la forme

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = C e^{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}. \quad (1.2)$$

C'est cette coexistence des ondes et des corpuscules ou bien les relations de dualité onde-corpuscule.

1.1 Les postulats de la mécanique quantique

La mécanique quantique a une formulation mathématique totalement différente de celle de la mécanique déterministe de Newton. On sait qu'il n'est pas possible de déterminer exactement la trajectoire d'une particule quantique. Cependant, on peut accéder à la probabilité de trouver le système (la particule) en un point donné de l'espace [1, 2, 3]. Au lieu de parler de la trajectoire, on introduit une fonction de probabilité qui représente en quelque sorte la généralisation de

la notion d'onde aux particules matérielles. Elle est définie dans le premier postulat de la mécanique quantique.

Postulat1 : A un instant t , l'état physique d'une particule quantique est défini par une fonction, $\Psi(\mathbf{x}, t)$, continue ainsi que sa dérivée première, et dont le carré du module $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$ est sommable. Dans la représentation de Dirac, en fait correspondance à cette fonction un Ket $|\Psi\rangle$ appartenant à un espace vectoriel de Hilbert tel que $\Psi(\mathbf{x}, t) = \langle \mathbf{x} | \Psi \rangle$.

Postulat2 : Toute grandeur physique mesurable A est représentée par un opérateur hermitien \hat{A} , agissant dans l'espace vectoriel des états \mathcal{H} et dont l'ensemble orthonormé des fonctions propres $|\varphi_n^i\rangle$ de \hat{A} forme une base de l'ensemble des états.

Postulat3 : Si le système se trouve dans l'état $|\Psi\rangle$, la mesure d'une variable dynamique A s'exprime par l'action de l'opérateur \hat{A} sur cette état.

Remarque : \hat{A} étant une observable, ses valeurs propres sont donc réelles.

Postulat4 : Lorsque l'on mesure la grandeur physique A sur un système dans un état $|\Psi\rangle$, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir la valeur propre a_n est la valeur moyenne du projecteur $\sum_{i=1}^g |\varphi_n^i\rangle \langle \varphi_n^i|$ dans l'état du système

$$P(a_n) = \langle \Psi | \left(\sum_{i=1}^g |\varphi_n^i\rangle \langle \varphi_n^i| \right) | \Psi \rangle, \quad (1.3)$$

où i représente l'indice de la dégénérescence et g le degré de la dégénérescence.

Postulat5 : Si la mesure de l'observable A donne le résultat a_n , et si cette valeur propre est dégénérée, l'état du système immédiatement après cette mesure est la projection du vecteur d'état $|\Psi\rangle$ sur le sous- espace propre correspondant $\frac{P_n|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}}$.

Postulat6 : L'évolution au cours du temps d'un système physique décrit par l'état $|\Psi\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle, \quad (1.4)$$

où H est l'opérateur Hamiltonien hermitique associé à l'énergie totale de ce système.

1.2 L'équation de Schrödinger

Entre 1925 et 1926, Erwin Schrödinger réalisa ses travaux de synthèse de la mécanique ondulatoire de de Broglie et sortit son article fondateur [4] "Quantification et valeurs propres"

dans les célèbres "*Annalen der Physik*" - vol 79 - 1926. A travers cet article, il réalise la synthèse entre l'approche de la dynamique des particules de Hamilton et l'approche ondulatoire du même Hamiltonien. Schrödinger s'est aperçu qu'il était possible de passer du formalisme corpusculaire au formalisme ondulatoire en remplaçant les coordonnées p et q Hamiltoniennes du premier formalisme par des opérateurs différentiels. Ce qui aboutit à sa célèbre équation qui est l'équivalent en mécanique quantique de la loi de conservation de l'énergie.

Cette équation décrit l'évolution dans le temps du vecteur d'état $\Psi(\mathbf{x}, t)$ d'un système quantique arbitraire. Elle est équivalente à un problème aux valeurs propres dans la théorie des espaces de Hilbert. On peut facilement déduire l'équation de Schrödinger à partir de la fonction d'onde $\Psi(\mathbf{x}, t)$ de Broglie (1.2). Les dérivées partielles par rapport à x , y , z et t de cette fonction donnent :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(\mathbf{x}, t) &= \frac{i}{\hbar}p_x\Psi(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial}{\partial y}\Psi(\mathbf{x}, t) &= \frac{i}{\hbar}p_y\Psi(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial}{\partial z}\Psi(\mathbf{x}, t) &= \frac{i}{\hbar}p_z\Psi(\mathbf{x}, t), \\ \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x}, t) &= -\frac{i}{\hbar}E\Psi(\mathbf{x}, t).\end{aligned}$$

On déduit que, pour chaque grandeur de la mécanique classique, on fait correspondre un opérateur différentiel

$$\begin{aligned}\mathbf{p} &\rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \\ E &\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.\end{aligned}$$

Pour une particule de masse m soumise à une force dérivant d'un potentiel scalaire $V(\mathbf{x})$, son Hamiltonien est égale à l'énergie E du système physique (la somme d'énergie cinétique et potentiel), tel que

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}), \quad (1.5)$$

Appliquons à cette équation les règles de correspondance énoncées ci-dessus. On obtient immédiatement

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{x}, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x}) \right] \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1.6)$$

En utilisant l'opérateur (1.5), on peut simplifier l'équation (1.6) en

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{x}, t) = H \Psi(\mathbf{x}, t). \quad (1.7)$$

C'est l'équation fondamentale de la mécanique quantique dite "*équation de Schrödinger*". c'est une équation différentielle linéaire ; c'est-à-dire pour deux solutions différentes Ψ_1 et Ψ_2 la combinaison linéaire est encore solution. Schrödinger a postulé cette équation pour représenter les états d'un système quantique. Elle a été confrontée à l'expérience et celle-ci a montré qu'on pouvait déduire toutes les données expérimentales de l'équation. La fonction d'onde d'un système $\Psi(\mathbf{x}, t)$ contient toute l'information que l'on peut connaître du système. La question qui se pose, que signifie physiquement cette fonction $\Psi(\mathbf{x}, t)$?

L'équation de Schrödinger est une équation aux valeurs propres pour l'opérateur Hamiltonien du système. Ses solutions sont des fonctions propres (ou des combinaisons linéaires de fonctions propres) de l'Hamiltonien. L'interprétation communément admise aujourd'hui est l'interprétation probabiliste proposée par Born et Jordan en 1926 que nous allons présenter très succinctement.

Plusieurs expériences, en particulier les fentes de Young, laissaient penser que la fonction d'onde pouvait avoir un rapport plus ou moins lointain avec une probabilité de présence de la particule dans un endroit donné. Par exemple, dans l'expérience d'interférence de Young, les franges brillantes où l'intensité est élevée correspond à une probabilité élevée d'arrivée des photons ou des particules matérielles alors que les franges sombres sont des zones où cette probabilité est faible. Cette supposition découle de la mécanique ondulatoire de Broglie. En électromagnétisme, l'intensité des franges d'interférence est donnée par le carré des champs \mathbf{E} et \mathbf{B} . Born et Jordan ont donc eu l'idée d'étudier le carré du module de $\Psi(\mathbf{x}, t)$, $|\Psi|^2 = \Psi\Psi^*$. Ils ont déduit que la fonction Ψ désigne une amplitude de probabilité de présence.

En mécanique quantique, la probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un élément de volume dV entourant le point \mathbf{x} est

$$dP = |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 dV \Rightarrow P = \int_V |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 dV. \quad (1.8)$$

La conservation de la probabilité dans toute l'espace nous donne

$$dP = |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 dV \Rightarrow P = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 dV = 1. \quad (1.9)$$

La connaissance de $\Psi(\mathbf{x}, t)$ permet alors de connaître l'évolution dynamique de la probabilité de trouver la particule dans un volume dV autour de tout point \mathbf{x} en fonction du temps. Si la probabilité est grande pour dV petit, on pourrait avoir une analogie avec la trajectoire au sens classique.

La condition de normalisation précédente impose que Ψ soit de carré sommable. De plus, comme l'équation de Schrödinger (1.6) fait intervenir la dérivée seconde à travers le Laplacien Δ , Ψ et ses premières dérivées doivent être continues. Il y a donc de fortes restrictions sur la classe des fonctions Ψ . Du point de vue mathématique, Ψ est un élément d'un espace de Hilbert. En effet, nous avons :

a) la propriété de linéarité : si Ψ_1 et Ψ_2 sont des solutions de l'équation de Schrödinger à carré sommable, alors

$$\Psi = \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2, \quad (1.10)$$

avec λ_1 et λ_2 appartenant à \mathbb{C} , est solution de l'équation de Schrödinger.

b) L'existence d'un produit scalaire entre Ψ et φ défini comme

$$\langle \Psi | \varphi \rangle = \int \Psi^* \varphi dV. \quad (1.11)$$

Si $\langle \Psi | \varphi \rangle = 0$, Ψ et φ sont dits orthogonaux.

On dira que Ψ est normé si $\langle \Psi | \Psi \rangle = \|\Psi\|^2 = 1$

c) Le produit scalaire satisfait la propriété

$$\langle \Psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \Psi \rangle^*. \quad (1.12)$$

d) Le produit scalaire satisfait l'inégalité de Schwartz

$$\|\langle \Psi | \varphi \rangle\|^2 \leq \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle \langle \varphi | \varphi \rangle} \quad (1.13)$$

e) On définit la valeur moyenne d'une observable \hat{A} par

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dV}{\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \Psi dV}. \quad (1.14)$$

Si Ψ est normée, $\langle \hat{A} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* \hat{A} \Psi dV$. Comme \hat{A} représente une quantité physique, $\langle \hat{A} \rangle$ doit être une quantité réelle et dans le langage des opérateurs, l'opérateur \hat{A} qui satisfait cette condition est un opérateur hermitique.

L'évolution de la probabilité au cours du temps est analogue à l'écoulement d'un fluide sans perte. Si la probabilité de présence augmente dans une région de l'espace, elle doit diminuer ailleurs. Schrödinger avait établi que son équation prévoyait une équation de conservation et donc la notion de courant [1, 3, 5] :

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.15)$$

où $\rho(\mathbf{x}, t) = \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t)$, représente la densité de probabilité et $\mathbf{J}(\mathbf{x}, t)$ la densité du courant

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}, t) = \frac{-i\hbar}{2m} [\Psi^*(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \Psi(\mathbf{x}, t) - \Psi(\mathbf{x}, t) \cdot \nabla \Psi^*(\mathbf{x}, t)]. \quad (1.16)$$

L'équation (1.15) montre que la densité de probabilité de présence se déplace suivant les lois de la mécanique classique.

1.3 Les inégalités de Heisenberg

En physique classique selon la deuxième loi de Newton on peut déterminer d'une façon exacte la position $x(t)$ et la vitesse $v(t)$ de la particule, si les coordonnées initiales $x(0)$, la vitesse initial $v(0)$ et toutes les forces agissant sur la particule sont connues.

Par contre en mécanique quantique, les concepts classiques de la position exacte et la vitesse exacte ne disposant pas de sens. Le principe d'incertitude de Heisenberg stipule qu'il est impossible de donner simultanément et avec une précision la position et l'impulsion d'une particule.

Du point de vue quantitatif, nous avons la relation d'incertitude de Heisenberg pour le cas d'une particule à une dimension [6]

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.17)$$

où $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ et $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$.

On voit que Δx est la fluctuation statistique de la mesure de x autour de la valeur moyenne $\langle x \rangle$. Il en est de même pour Δp_x . Selon la relation d'incertitude de Heisenberg, si $\Delta x = 0$ (mesure infiniment précise de la position), alors $\Delta p_x \rightarrow \infty$, donc une imprécision complète sur l'impulsion.

Il existe également une relation d'incertitude entre l'énergie et le temps :

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar. \quad (1.18)$$

Cette relation appelle une remarque sur la relation liant Δx et Δp_x et relie les mesures de x et p_x au même temps t . Dans la relation $\Delta E \Delta t$, le temps joue un rôle différent que E . L'énergie est une variable dynamique du système, alors que le temps est un paramètre.

La relation $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ relie donc le changement ΔE pendant le temps Δt caractéristique du taux de variation des quantités dynamiques du système. Cette relation est importante dans l'interprétation des temps de vie des particules.

1.4 Description quantique d'une particule libre

Dans les paragraphes précédents, nous avons introduit les concepts fondamentaux nécessaires à la description quantique d'une particule. Dans cette section, nous allons utiliser ces concepts pour déduire plusieurs propriétés très importantes dans le cas d'une particule libre.

Considérons une particule dont l'énergie potentielle est nulle (ou a une valeur constante) à chaque point de l'espace. L'étude des propriétés d'une particule libre unidimensionnelle dans le cadre de la mécanique quantique ne doit pas être fondée sur les trajectoires classiques, ce mouvement est déterminé par la résolution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = H \Psi(x, t), \quad (1.19)$$

où l'Hamiltonien $H = \frac{p^2}{2m}$. La fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger décrivant cette particule est une onde plane

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (1.20)$$

où A est une constante. Le vecteur d'onde k (une seule composante) et la fréquence angulaire ω sont liées à la quantité de mouvement p et à l'énergie E par les relations de de Broglie

$$E = \hbar \omega, \quad p = \hbar k \quad \text{et} \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.21)$$

Selon les relations de Broglie, l'énergie E et l'impulsion p d'une particule libre satisfont l'équation bien connue dans la mécanique classique $E = \frac{p^2}{2m}$.

Une onde plane de type (1.20) représente une particule dont la probabilité de présence, $\|\Psi\|^2 = \|A\|^2$, est uniforme dans tout l'espace. Le principe de la superposition stipule que toute combinaison linéaire d'ondes planes satisfaisant (1.21) sera également une solution d'équation (1.19). Une telle superposition peut être écrite [1, 6]

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (1.22)$$

où l'amplitude du paquet d'ondes $g(k)$ est la transformée de Fourier de $\Psi(x, t)$ à l'instant $t = 0$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx, \quad (1.23)$$

Par conséquent, la validité de la transformée de Fourier inverse de (1.23) n'est pas limitée au cas d'une particule libre, mais $\Psi(x, 0)$ peut toujours être écrite sous cette forme quel que soit le potentiel.

L'impulsion, la position et l'énergie de la particule ne sont plus connues exactement ; seuls les résultats probabilistes sont possibles, qu'on va voir par la suite. Le paquet d'ondes (1.22) est normalisable. Alors, une particule libre ne peut pas être représentée par une seule onde plane (monochromatique) ; elle doit être représentée par un paquet d'ondes.

1.4.1 Paquet d'ondes Gaussien

Pour trouver la fonction d'onde $\Psi(x, 0)$ sous forme d'une Gaussienne, on prend $g(k)$ sous la forme [6]

$$g(k) = \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{4}\right]. \quad (1.24)$$

La fonction $g(k)$ est centrée autour du point k_0 . la fonction d'onde $\Psi(x, 0)$ est

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{a^2(k - k_0)^2}{4} + ikx\right] dk, \end{aligned}$$

après intégration on trouve

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{x^2}{a^2}\right] \exp[ik_0 x], \quad (1.25)$$

où $\exp [ik_0x]$ est la phase de $\Psi(x, 0)$. Cette fonction $\Psi(x, 0)$ est une onde oscillante avec le nombre d'onde k_0 modulé par une Gaussienne centrée à l'origine. De plus, les équations (1.24) et (1.25) montrent que la transformée de Fourier d'un paquet d'onde Gaussien est également un paquet d'onde Gaussien.

La largeur Δx du paquet dans l'espace réel et la largeur Δk dans l'espace de Fourier sont données par

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{a}{2}, \\ \Delta k &= \sqrt{\langle k^2 \rangle - \langle k \rangle^2} = \frac{1}{a};\end{aligned}$$

par conséquent $\Delta x \Delta k = \frac{1}{2}$. Puisque $\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$; nous avons donc

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (1.26)$$

Remarquons que le paquet d'onde Gaussien donne le minimum d'incertitude de Heisenberg.

1.4.2 Evolution temporelle du paquet d'onde

Pour déterminer l'évolution temporelle du paquet d'onde d'une particule libre, il faut trouver la forme du paquet d'onde à un instant quelconque t , $\Psi(x, t)$. En injectant l'amplitude $g(k)$ défini par l'équation (1.24) dans l'équation (1.22) on obtient

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{-a^2 (k - k_0)^2}{4} \right] \exp [i(kx - \omega(k)t)] dk, \quad (1.27)$$

où $\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$ représente la relation de dispersion d'une particule libre. Sous le changement de variable $q = k - k_0$, l'exposant de l'intégrale de (1.27) s'écrit

$$\begin{aligned}& \frac{-a^2 (k - k_0)^2}{4} + i(kx - \omega(k)t) \\ &= -\alpha \left[q - \frac{i}{2\alpha} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right) \right]^2 - \frac{1}{4\alpha} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right)^2 \\ & \quad + ik_0 \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right),\end{aligned} \quad (1.28)$$

où on a utilisé la relation $-\alpha q^2 + iyq = -\alpha \left[q - \frac{iy}{2\alpha} \right]^2 - \frac{y^2}{4\alpha}$, avec $\alpha = \frac{a^2}{4} + i\frac{\hbar t}{2m}$ et $y = x - \frac{\hbar k_0 t}{m}$. En remplaçant (1.28) dans l'équation (1.27) on trouve

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{a^2}{2\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[ik_0 \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m} \right) \right] \exp \left[-\frac{1}{4\alpha} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right)^2 \right] \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\alpha \left[q - \frac{i}{2\alpha} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right) \right]^2 \right\} dq. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Après intégration cette fonction s'écrit comme suite

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \left(\frac{a^2}{8\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp \left[ik_0 \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m} \right) \right] \exp \left[-\frac{1}{4\alpha} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m} \right)^2 \right]. \quad (1.30)$$

La densité de probabilité est le module au carré de la fonction d'onde (1.27)

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} \frac{1}{\gamma(t)} \exp \left\{ -\frac{2}{a^2 \gamma^2(t)} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m} \right)^2 \right\}, \quad (1.31)$$

où $\gamma(t) = \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}}$. Nous pouvons montrer que cette densité de probabilité est toujours conservée

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.32)$$

La largeur $\Delta x(t)$ (l'écart-type) du paquet d'onde à instant quelconque t est

$$\Delta x(t) = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} = \frac{a}{2} \gamma(t). \quad (1.33)$$

Ainsi, on peut écrire la densité de probabilité (1.31) sous une forme plus élégante comme suit

$$|\Psi(x, t)|^2 = \sqrt{\frac{1}{2\pi [\Delta x(t)]^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2 [\Delta x(t)]^2} \left(x - \frac{\hbar k_0 t}{2m} \right)^2 \right\}, \quad (1.34)$$

ce qui montre qu'au cours du temps, le centre du paquet d'ondes se déplace du point $x = 0$ au point $x(t)$ et sa largeur étendu de $\Delta x_0 = \frac{a}{2}$ à $\Delta x(t) = \frac{a}{2} \gamma(t)$. On a aussi $g(k, t) = g(k, 0)$, ce qui implique que l'écart-type $\Delta k = \frac{1}{a}$ reste constante au cours du temps et de même pour l'incertitude $\Delta p = \frac{\hbar}{a}$ alors,

$$\Delta x(t) \Delta p = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^4}} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.35)$$

montre que la relation l'incertitude de Heisenberg est vérifiée à tous instants t .

Chapitre 2

Théorie des invariants

Résoudre l'équation de Schrödinger décrivant l'oscillateur harmonique dépendant du temps a reçu une attention considérable depuis longtemps [7]- [32]. La théorie des invariants introduite pour la première fois par Lewis et Riesenfeld (1969) pour résoudre les problèmes de l'oscillateur harmonique avec fréquence dépendante du temps donne un caractère typique et puissant pour étudier ce système [33].

Cette théorie consiste à relier les états propres de l'opérateur invariant à la solution de l'équation de Schrödinger. La théorie des invariants est une méthode puissante pour étudier les systèmes quantiques dépendants du temps et offre plusieurs applications dans la description des systèmes physiques dans différents domaines [34]-[50].

Avant d'aborder brièvement dans ce chapitre la théorie des invariants de Lewis Riesenfeld et son application à un oscillateur harmonique avec masse et fréquence variable [33]. Nous donnons d'abord un bref aperçu de quelques résultats fondamentaux sur l'oscillateur harmonique qui est un système d'une grande importance que se soit en mécanique classique ou quantique, car il décrit les oscillations des systèmes physiques autour d'une position d'équilibre stable.

2.1 Bref Rappel sur l'oscillateur harmonique

L'hamiltonien d'un oscillateur unidimensionnel de masse M et de pulsation ω est

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega\hat{x}^2, \quad (2.1)$$

où \hat{x} et \hat{p} sont respectivement les opérateurs position et impulsion vérifiant la relation de commutation

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (2.2)$$

En introduisant les opérateurs d'annihilation \hat{a} et de création \hat{a}^+ associés à H

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{M\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{M\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{M\omega} \hat{p} \right). \quad (2.3)$$

Les relations de commutations de ces opérateurs sont

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, \quad (2.4)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad (2.5)$$

$$[\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+, \quad (2.6)$$

où $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$ est l'opérateur nombre de particules. Dans ce cas H peut s'écrire sous la forme

$$H = \hbar\omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.7)$$

Dans la base propre usuelle $|n\rangle$ ($|n\rangle$ est un élément de l'espace de Fock), l'effet des opérateurs d'annihilation \hat{a} , création \hat{a}^+ et nombre de particules \hat{N} sont donnés comme suit

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad (2.8)$$

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (2.9)$$

$$\hat{N} |n\rangle = \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle. \quad (2.10)$$

L'état fondamental $|0\rangle$ vérifie

$$\langle 0 | 0 \rangle = 1 \quad (2.11)$$

$$\hat{a} |0\rangle = 0 \quad (2.12)$$

2.2 Solution de L'équation de Schrödinger dépendante du temps

La théorie des invariants, ou théorie de Lewis-Riesenfeld, à été d'un grand apport pour l'obtention de la solution de l'équation Schrödinger pour des systèmes dépendant explicitement

du temps. Cette théorie consiste à relier les états propres de l'opérateur invariant Hermitique $\hat{I}(t) \equiv I(t)$ à la solution de l'équation de Schrödinger décrite par un Hamiltonien $H(t)$ dépendant explicitement du temps

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle, \quad (2.13)$$

où l'opérateur invariant $I(t)$ vérifie l'équation de Von-Neuman

$$\frac{dI(t)}{dt} = \frac{\partial I(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)] = 0. \quad (2.14)$$

Nous constatons que l'action de l'invariant sur un vecteur d'état $|\psi\rangle$ solution de l'équation de Schrödinger (2.13) est aussi solution de l'équation Schrödinger suivante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I(t) |\psi(t)\rangle) = H(t) (I(t) |\psi(t)\rangle). \quad (2.15)$$

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

$$I(t) |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle = \lambda |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle, \quad (2.16)$$

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

$$\langle \varphi_{\lambda',k'}(t) | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle = \delta_{\lambda',\lambda} \delta_{k',k}. \quad (2.17)$$

En vertu de l'hermiticité de $I(t)$, les valeurs propres λ sont réelles et indépendantes du temps, en effet, la dérivée par rapport au temps de l'équation (2.16) donne

$$\frac{\partial I}{\partial t} |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle + I \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle = \frac{\partial \lambda}{\partial t} |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle + \lambda \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle, \quad (2.18)$$

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

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle \varphi_{\lambda,k}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda,k'}(t) \rangle. \quad (2.19)$$

La valeur moyenne de (2.14) dans les états s'écrit

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda',k'}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle + (\lambda' - \lambda) \langle \varphi_{\lambda',k'}(t) | H | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle = 0, \quad (2.20)$$

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

$$\langle \varphi_{\lambda,k}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda,k'}(t) \rangle = 0, \quad (2.21)$$

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

Le fait que les valeurs propres λ sont constantes permet de faire le lien entre les états propres de $I(t)$ et les solutions de l'équation de Schrödinger, en effet l'équation (2.18) multiplié à gauche par $\langle \varphi_{\lambda',k'}(t) |$ donne

$$(\lambda - \lambda') \langle \varphi_{\lambda',k'}(t) | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle = \langle \varphi_{\lambda',k'}(t) | \frac{\partial I}{\partial t} | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle, \quad (2.22)$$

qui, pour $\lambda' \neq \lambda$, permet d'écrire l'équation (2.20) sous la forme suivante

$$i\hbar \langle \varphi_{\lambda',k'} | \frac{\partial}{\partial t} | \varphi_{\lambda,k} \rangle = \langle \varphi_{\lambda',k'} | H | \varphi_{\lambda,k} \rangle. \quad (2.23)$$

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

$$|\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle_{\alpha} \equiv \exp[i\alpha_{\lambda k}(t)] |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle, \quad (2.24)$$

où $\alpha_{\lambda k}(t)$ est une fonction réelle du temps arbitrairement choisie. Ces $|\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle_{\alpha}$ sont aussi des états propres orthonormés de $I(t)$ associés aux valeurs propres λ . Si on choisit bien les phases $\alpha_{\lambda k}(t)$, l'équation (2.23) sera vérifiée pour $\lambda = \lambda'$ et donc l'objectif sera atteint. Il faut juste avoir le choix des phase $\alpha_{\lambda k}(t)$ tel que

$$\hbar \delta_{kk'} \frac{d\alpha_{\lambda k}}{dt} = \langle \varphi_{\lambda,k'}(t) | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle. \quad (2.25)$$

Ce choix montre que l'équation (2.23) pour $|\varphi_{\lambda,k}\rangle_{\alpha}$ est vérifiée pour $\lambda = \lambda'$ et les élément non diagonaux $\langle \varphi_{\lambda,k'}(t) | (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H) | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle$ sont identiquement nuls. Pour $k = k'$, la phase $\alpha_{\lambda k}(t)$ vérifie l'équation :

$$\hbar \frac{d\alpha_{\lambda k}}{dt} = \langle \varphi_{\lambda,k}(t) | \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) | \varphi_{\lambda,k}(t) \rangle. \quad (2.26)$$

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

$$|\psi\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k}(0) \exp[i\alpha_{\lambda k}(t)] |\varphi_{\lambda,k}(t)\rangle. \quad (2.27)$$

2.3 Choix de l'invariant

Une fois qu'on connaît l'intérêt d'utiliser les invariants pour obtenir les solutions, on peut attaquer directement le problème de trouver ces invariants. Il n'y a pas une procédure définie au préalable qui permet de construire des invariants. Par exemple, dans le cas de l'oscillateur harmonique dépendant du temps décrit par l'Hamiltonian

$$H(t) = \left[\frac{p^2}{2M(t)} + \frac{1}{2}M(t)\omega^2(t)x^2 \right], \quad (2.28)$$

où $x \equiv \hat{x}$ est l'opérateur canonique et $p \equiv \hat{p}$ son moment conjugué, la fréquence $\omega(t)$ et la masse $M(t)$ sont des fonction dépendantes du temps. Le système quantique (2.28) présente un grand intérêt en mécanique quantique. La théorie des invariants est une méthode typique et puissante pour étudier ce système, car il peut être traité d'une manière formellement exacte et offre plusieurs applications dans la description des systèmes physiques dans différents domaines.

Dans leur article originale, Lewis et Riesenfeld [33] avaient supposés que l'opérateur invariant $I(t)$ a une forme quadratique en p et x

$$I(t) = \frac{1}{2} \left\{ \rho^2 p^2 - M \rho \dot{\rho} (px + xp) + \frac{1}{\rho^2} (1 + M^2 \rho^2 \dot{\rho}^2) x^2 \right\}, \quad (2.29)$$

où $\rho(t)$ vérifie l'équation auxiliaire non linéaire ou equation d'Emakov-Pinney :

$$\ddot{\rho} + \frac{\dot{M}}{M} \dot{\rho} + \rho \omega^2 = \frac{1}{M^2 \rho^3}. \quad (2.30)$$

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

$$I(t) |\phi_n(t)\rangle = \lambda_n |\phi_n(t)\rangle, \quad (2.31)$$

conduit à [37]

$$\phi_n(x, t) = \left[\frac{1}{n! 2^n \rho \sqrt{\hbar \pi}} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{iM}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}}{\rho} + \frac{i}{M\rho^2} \right) x^2 \right] H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x}{\rho} \right) \right]. \quad (2.32)$$

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

$$\lambda_n = \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (2.33)$$

un calcul direct montre que la phase $\alpha_n(t)$ (2.26) s'écrit

$$\alpha_n(t) = - \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{dt'}{M(t') \rho^2}. \quad (2.34)$$

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

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) = & \left[\frac{1}{n! 2^n \rho \sqrt{\hbar \pi}} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{iM}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}}{\rho} + \frac{i}{M\rho^2} \right) x^2 - i \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{dt'}{M(t') \rho^2} \right] \\ & \times H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x}{\rho} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.35)$$

ainsi, la solution générale de l'équation de Schrödinger est

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \sum_n C_n \left[\frac{1}{n! 2^n \rho \sqrt{\hbar \pi}} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{iM}{2\hbar} \left(\frac{\dot{\rho}}{\rho} + \frac{i}{M\rho^2} \right) x^2 - i \left(n + \frac{1}{2} \right) \int_0^t \frac{dt'}{M(t') \rho^2} \right] \\ & \times H_n \left[\left(\frac{1}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{x}{\rho} \right) \right], \end{aligned} \quad (2.36)$$

où

$$C_n = \langle \phi_n(0) | \Psi(0) \rangle \quad (2.37)$$

Pour traiter le même exemple, c'est à dire l'oscillateur harmonique dépendant du temps, on pourrait choisir un invariant linéaire en p et x [51]

$$I(t) = A(t)p + B(t)x + C(t), \quad (2.38)$$

où $A(t)$, $B(t)$ et $C(t)$ sont des coefficients réels dépendants du temps. L'opérateur invariant $I(t)$ est hermitien et satisfaisant l'équation de Liouville-Von Neumann (2.14). La substitution des équations (2.28) et (2.38) dans l'équation (2.14) donne

$$\begin{aligned} \dot{B}(t) &= A(t)M(t)\omega^2(t), \\ \dot{A}(t) &= -\frac{B(t)}{M(t)}, \\ \dot{C}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Les deux premières équations nous conduisent à l'équation différentielle du second ordre

$$\ddot{A} + \frac{\dot{M}}{M} \dot{A} + \omega^2 A = 0. \quad (2.40)$$

Par conséquent, toute solution réelle de cette équation conduit à un invariant de la forme

$$I(t) = A(t)p - M(t)\dot{A}(t)x + C_0, \quad (2.41)$$

où C_0 est une constante réelle arbitraire qui est prise égale à zéro (Pedrosa), cette hypothèse sera discutée au Chapitre 4 .

Les états propres $\varphi_\lambda(x, t)$ de $I(t)$ sont les solutions de l'équation aux valeurs propres

$$I(t)\varphi_\lambda(x, t) = \lambda\varphi_\lambda(x, t), \quad (2.42)$$

où les valeurs propres λ sont indépendantes du temps. Nous pouvons montrer que les solutions $\varphi_\lambda(x, t)$ de l'équation (2.42) sont de la forme

$$\varphi_\lambda(x, t) = \sqrt{\frac{1}{2\hbar\pi A(t)}} \exp\left[\frac{i}{2\hbar A(t)} (2\lambda x + M(t)A(t)x^2)\right]. \quad (2.43)$$

selon la théorie des invariants qui consiste à relier les états propres de l'opérateur invariant et la solution de l'équation de Schrödinger par le facteur de phase $\exp[i\mu_\lambda(t)]$, où la phase $\mu_\lambda(t)$ obéit à l'équation (2.24),

$$\mu_\lambda(t) = -\frac{\lambda^2}{2\hbar} \int_0^t \frac{1}{M(t')A^2(t')} dt'. \quad (2.44)$$

D'où la solution générale de l'équation Schrödinger (2.13) associée à l'oscillateur harmonique dépendant du temps (2.28) s'écrit

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \exp[i\mu_\lambda(t)] \varphi_\lambda(x, t) d\lambda, \quad (2.45)$$

où $g(\lambda)$ est une fonction poids constante donnée par

$$g(\lambda) = \langle \varphi_\lambda(0) | \Psi(0) \rangle. \quad (2.46)$$

Finalement, nous constatons que les solutions (2.36) et (2.45) correspondent au cas discret et au cas continue et constituent un ensemble complet de solutions de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique dépendant du temps décrit par l'Hamiltonien (2.28). Cet ensemble complet de solutions s'écrit sous la forme

$$\Psi(x, t) = \sum_n C_n \exp[i\alpha_n(t)] \phi_n(x, t) + \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \exp[i\mu_\lambda(t)] \varphi_\lambda(x, t) d\lambda, \quad (2.47)$$

où C_n et $g(\lambda)$ sont respectivement donnés par les équations (2.37) et (2.46).

Avant d'aborder la notion des états cohérents, notons que l'invariant linéaire $I(t)$ (2.36) a été à la base de la construction des paquets d'ondes Gaussian ou états cohérents pour l'oscillateur harmonique dépendant du temps. A cet effet il suffit de prendre les coefficients $A(t)$, $B(t)$ complexes et $C(t) = C_0 = 0$ et par conséquent l'invariant est non -Hermitique et joue le rôle d'un opérateur annihilation. Le but de notre Travail est de montrer qu'il n'est pas nécessaire de prendre $A(t)$, $B(t)$ et $C(t)$ complexes pour construire des états cohérents c'est à dire prendre l'invariant linéaire Hermitique ce qui est conforme avec la théorie de Lewis -Riensenfeld originale.

Chapitre 3

Les états cohérents

Les états cohérents, ou états semi-classiques, sont des états quantiques remarquables définis pour l'oscillateur harmonique au départ. Les valeurs moyennes des opérateurs positions et impulsions dans ces états ont des propriétés proches des valeurs classiques de la position $q_c(t)$ et de l'impulsion $p_c(t)$ [2].

Historiquement, les états cohérents ont été introduits pour la première fois, en 1926, par Schrödinger [4] dans le but de reproduire les solutions classiques d'un oscillateur harmonique. En 1963, Glauber a réintroduit les états cohérents dans le contexte de l'optique quantique où ces états constituent un outil, à la fois nécessaire et efficace pour décrire les radiations d'une émission laser [52]. Au cours de la même année, Klauder, [53] a défini un système d'états similaires à ceux de Glauber, dans l'objectif de voir, en terme des valeurs moyennes, la relation entre système quantique et classique.

3.1 Les états cohérents de l'oscillateur harmonique

Dans la littérature, il existe trois approches équivalentes qui permettent de définir les états cohérents de l'oscillateur harmonique :

- **première approche** : les états cohérents $|\alpha\rangle$ sont définis comme des états propres de l'opérateur d'annihilation $\hat{a} \equiv a$

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (3.1)$$

où α est un paramètre complexe. Les états cohérents normalisés $|\alpha\rangle$ sont donnés par [52] :

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (3.2)$$

et leurs conjugués hermétique $\langle\alpha|$

$$\langle\alpha| = \langle n| e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha^*)^n}{\sqrt{n!}} \quad (3.3)$$

• **deuxième approche** : les états cohérents peuvent aussi s'obtenir à partir du vide $|0\rangle$ par l'action de l'opérateur de déplacement $D(\alpha) = \exp(\alpha a^+ - \alpha^* a)$

$$D(\alpha) |0\rangle = \exp(\alpha a^+ - \alpha^* a) |0\rangle. \quad (3.4)$$

L'opérateur de déplacement est unitaire :

$$D^+(\alpha) = D(-\alpha) = [D(\alpha)]^{-1}, \quad (3.5)$$

$$D^+(\alpha) D(\alpha) = D(\alpha) D^+(\alpha) = 1. \quad (3.6)$$

On peut trouver d'autres expressions utiles pour l'opérateur $D(\alpha)$ à l'aide de la formule de Baker-Campbell-Hausdorff. Si A et B sont deux opérateurs tels que :

$$[[A, B], A] = [[A, B], B] = 0, \quad (3.7)$$

alors

$$e^{A+B} = e^{-[A,B]/2} e^A e^B = e^{[A,B]/2} e^B e^A, \quad (3.8)$$

et donc

$$e^A e^B = e^{[A,B]} e^B e^A. \quad (3.9)$$

En posant $A = \alpha a^+$ et $B = -\alpha^* a$, on trouve deux expressions équivalentes de l'opérateur $D(\alpha)$ (3.9)

$$D(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^+} e^{-\alpha^* a}, \quad (3.10)$$

$$D(\alpha) = e^{\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{-\alpha^* a} e^{\alpha a^+}. \quad (3.11)$$

L'opérateur de déplacement $D(\alpha)$ a les propriétés suivantes :

$$D^+(\alpha) a D(\alpha) = D^{-1}(\alpha) a D(\alpha) = a + \alpha, \quad (3.12)$$

$$D^+(\alpha) a^+ D(\alpha) = D^{-1}(\alpha) a^+ D(\alpha) = a^+ + \alpha^*, \quad (3.13)$$

on peut aussi montrer que

$$D(\alpha + \beta) = D(\alpha) D(\beta) e^{i \operatorname{Im} \alpha \beta^*} \quad (3.14)$$

Cette dernière propriété permet de montrer simplement que : si un oscillateur harmonique initialement dans son état fondamental est couplé pendant un intervalle de temps $[t_1, t_2]$ à une force classique $F(t)$, il se trouvera pour $t > t_2$ dans un état cohérent déterminé par la transformée de Fourier $\tilde{F}(\omega)$ de $F(t)$

$$\tilde{F}(\omega) = \int_{t_1}^{t_2} e^{i\omega t} F(t) dt. \quad (3.15)$$

Si on applique D^+ sur les deux membres de l'équation (3.1), on obtient

$$D^+ a |\alpha\rangle = D^+ a D D^+ |\alpha\rangle = \alpha D^+ |\alpha\rangle, \quad (3.16)$$

en utilisant la propriété (3.12), on trouve

$$a (D^+(\alpha) |\alpha\rangle) = 0. \quad (3.17)$$

On peut déduire d'après (2.12) que

$$D^+(\alpha) |\alpha\rangle = |0\rangle, \quad (3.18)$$

qui est équivalente à

$$|\alpha\rangle = D(\alpha) |0\rangle. \quad (3.19)$$

Donc, l'action de l'opérateur $D(\alpha)$ sur les état de référence $|0\rangle$ (l'état du vide) génère les états cohérent $|\alpha\rangle$.

• **troisième approche** : on peut aussi définir les états cohérents pour l'oscillateur harmonique comme des états qui minimise la relation d'incertitude d'Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Sachant que les opérateurs positions x et l'impulsions p sont donnés par

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega M}} (a^+ + a) \\ p &= i\sqrt{\frac{\hbar\omega M}{2}} (a^+ - a), \end{aligned} \quad (3.20)$$

et les variances par

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \quad (3.21)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2. \quad (3.22)$$

Les valeurs moyennes des opérateurs x et p dans ces états sont

$$\langle x \rangle = \langle \alpha | x | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{M\omega}} \operatorname{Re} \alpha, \quad (3.23)$$

$$\langle p \rangle = \langle \alpha | p | \alpha \rangle = \sqrt{2\hbar M\omega} \operatorname{Im} \alpha, \quad (3.24)$$

et les fluctuations correspondantes

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}, \quad \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar M\omega}{2}}, \quad (3.25)$$

ainsi le produit

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (3.26)$$

est minimale. En ce sens, les états cohérents se rapprochent des trajectoires classiques, d'où le nom d'états *quasi-classiques*. Ces propriétés ont été pleinement démontrées dans la littérature [4, 52, 53, 54, 55, 56, 57].

3.1.1 Propriétés des états cohérents

1- Les états cohérent ne sont pas orthogonaux entre eux.

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle 0 | D^+(\beta) D(\alpha) | 0 \rangle, \quad (3.27)$$

utilisant l'équation (3.2)

$$\begin{aligned}
\langle \beta | \alpha \rangle &= e^{\frac{-|\beta|^2}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta^*)^m}{\sqrt{m!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle m | n \rangle \\
&= e^{\frac{-|\beta|^2}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta^* \alpha)^n}{n!} \\
&= e^{\frac{-|\beta|^2}{2} - \frac{|\alpha|^2}{2} + \beta^* \alpha},
\end{aligned} \tag{3.28}$$

ce qui signifie que les états cohérents $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ ne sont pas mutuellement orthogonaux et le module au carré du produit $\langle \beta | \alpha \rangle$ représente la mesure de la distance entre les deux états cohérents.

2- L'état cohérent $|\alpha\rangle$ est normalisé et la démonstration est évidente si on pose que $\alpha = \beta$ dans la formule précédente (3.28)

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1. \tag{3.29}$$

3-Bien connu également est la propriété des ces états formant une base sur complète

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha = 1. \tag{3.30}$$

Pour montrer cette identité, on pose que $\alpha = \rho e^{i\theta} \Rightarrow d^2\alpha = \rho d\rho d\theta$ et à l'aide de la formule (3.2), on a

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\pi} \frac{\rho^{n+m}}{\sqrt{n!m!}} e^{i(n-m)\theta} e^{-\rho^2},$$

en utilisant le fait que : $\int_0^{\infty} d\theta e^{i(n-m)\theta} = 2\pi\delta_{nm}$ et sous le changement de variable $\rho^2 = u$ l'intégrale prend la forme

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d^2\alpha = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|n\rangle \langle n|}{n!} \int_0^{\infty} du e^{-u} u^n, \tag{3.31}$$

après intégration ($\int_0^{\infty} du e^{-u} u^n = n!$), on obtient la relation de fermeture (3.30).

4- Les valeurs moyennes $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$ et $\langle H \rangle$ dans ces états $|\alpha\rangle$, restent constamment égales aux grandeurs classiques correspondantes.

3.2 Evolution temporelle des états cohérents

L'évolution temporelle d'un état decrite par l'équation de Schrödinger (2.13) s'intègre facilement dans le cas où H est stationnaire ($\hbar = 1$) :

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle = e^{-iH(t-t_0)} |\psi(t_0)\rangle, \quad (3.32)$$

où $U(t) = e^{-iH(t-t_0)}$ est l'opérateur d'évolution. Supposons que l'oscillateur harmonique est à un instant $t_0 = 0$ dans un état

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha(0)\rangle = e^{-\frac{|\alpha(0)|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(0)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (3.33)$$

alors à un instant t , on a :

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= e^{-iHt} |\alpha(0)\rangle, \\ &= e^{-\frac{|\alpha(0)|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(0)^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle, \\ &= e^{-\frac{i}{2}\omega t} e^{-\frac{|\alpha(0)|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(0)e^{-i\omega t}]^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \end{aligned} \quad (3.34)$$

utilisant le fait que

$$\exp\left[-\frac{1}{2}|\alpha(0)|^2\right] = \exp\left[-\frac{1}{2}|\alpha(0)e^{-i\omega t}|^2\right]. \quad (3.35)$$

et posant $\alpha(t) = \alpha(0)e^{-i\omega t}$, l'équation (3.34) devient

$$\begin{aligned} |\alpha, t\rangle &= e^{-\frac{i}{2}\omega t} e^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[\alpha(t)]^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \\ &= e^{-\frac{i}{2}\omega t} |\alpha(t)\rangle. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Par conséquent, pour passer de l'état $|\alpha(0)\rangle$ à son évolué $|\alpha(t)\rangle$, il suffit de changer $\alpha \rightarrow \alpha(0)e^{-i\omega t}$ et de multiplier le ket obtenu par $e^{-\frac{i}{2}\omega t}$. Donc l'évolué d'un état cohérent reste toujours état cohérent et est propre de l'opérateur d'annihilation a au cours du temps, avec une valeur propre $\alpha(t) = \alpha(0)e^{-i\omega t}$

$$a |\alpha(0)\rangle = \alpha |\alpha(0)\rangle, \quad (3.37)$$

$$a |\alpha(t), t\rangle = \alpha(t) |\alpha(t), t\rangle. \quad (3.38)$$

Chapitre 4

Les états cohérents de la particule libre : Point de Vue de Bagrov et al

Ce chapitre sera consacré aux travaux de V G Bagrov et al [59] sur les propriétés des états cohérents de la particule libre utilisant la théorie des invariants non hermitique. S'inspirant des travaux de Dodonov et Man'ko [60] [61] , Bagrov et al [59] ont construit différentes familles d'états cohérents généralisées d'une particule libre non relativiste. Ils ont discutés en détail les propriétés de ces états, y compris les relations de complétudes, la minimisation d'incertitude de Heisenberg et l'évolution de la densité de probabilité correspondante au cours du temps. Ils ont aussi décrit les conditions physiques pour que ces états peuvent être considérées comme des états semi-classiques. Utilisant la méthode des invariants linéaires non hermitiques, ils ont aussi étudiés les états cohérents de l'oscillateur inversé [62] et l'oscillateur généralisé [63] .

4.1 Invariant linéaire pour une particule libre

L'évolution d'une particule libre non relativiste de masse m à une dimension est régit par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = H_x\Psi(x,t), \quad (4.1)$$

où $H_x = \frac{p_x^2}{2m}$, L'équation (4.1) peut se mettre sous la forme

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H_x \right] \Psi(x, t) = 0. \quad (4.2)$$

Il est utile d'introduire les variables sans dimension suivantes :

$$q = \frac{x}{l} \quad \text{et} \quad \tau = \frac{\hbar}{ml^2} t. \quad (4.3)$$

L'équation (4.2) devient

$$S\Psi(q, \tau) = 0, \quad (4.4)$$

où $S = \left[i\frac{\partial}{\partial \tau} - H \right]$ avec $H_x = \frac{\hbar^2}{ml^2} H$, $H = \frac{p^2}{2}$, $p = -i\frac{\partial}{\partial q}$ et $\Psi(q, \tau) = \sqrt{l}\Psi(x, t)$. Dans ce cas, on peut facilement montrer que

$$|\Psi(x, t)|^2 dx = |\Psi(q, \tau)|^2 dq. \quad (4.5)$$

Introduisant les opérateurs d'annihilation et de création a et a^+

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip), \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip), \end{aligned}$$

tel que $[a, a^+] = 1$. L'hamiltonien H prend la forme quadratique suivante

$$H = \frac{1}{4} \left[a^+ a + a a^+ - (a^+)^2 - a^2 \right] \quad (4.6)$$

Pour cet Hamiltonien, Bagrov et al [59] introduisent un opérateur invariant linéaire en q et p et non hermétique $\mathcal{A}(\tau)$ tel que

$$\mathcal{A}(\tau) = f(\tau)q + ig(\tau)p + \varphi(\tau), \quad (4.7)$$

où $f(\tau)$, $g(\tau)$ et $\varphi(\tau)$ sont des fonctions complexes dépendants du temps τ .

Etant donné que les opérateurs $\mathcal{A}(\tau)$ et $\mathcal{A}^+(\tau)$ sont des invariants, c'est-à-dire; qu'ils vérifient les relations de commutation suivantes

$$[S, \mathcal{A}(\tau)] = 0 \quad (4.8)$$

$$[S, \mathcal{A}^+(\tau)] = 0 \quad (4.9)$$

On déduit que les coefficients $f(\tau)$, $g(\tau)$ et $\varphi(\tau)$ obeissent aux équations différentielles suivantes :

$$\begin{aligned}\dot{f}(\tau) &= 0, \\ \dot{g}(\tau) - if(\tau) &= 0, \\ \dot{\varphi}(\tau) &= 0,\end{aligned}$$

qui s'intègrent facilement pour donner

$$f(\tau) = c_1, \quad (4.10)$$

$$g(\tau) = c_2 + ic_1\tau, \quad (4.11)$$

$$\varphi(\tau) = \text{const}, \quad (4.12)$$

où c_1 et c_2 sont des constantes arbitraires. Le choix $\varphi(\tau) = 0$ permet d'écrire $\mathcal{A}(\tau)$ sous la forme d'un opérateur d'annihilation

$$\mathcal{A}(\tau) = c_1q + i[c_2 + ic_1\tau]p. \quad (4.13)$$

Le calcul du commutateur

$$[\mathcal{A}(\tau), \mathcal{A}^+(\tau)] = 2 \operatorname{Re}(g^*(\tau)f(\tau)) = 2 \operatorname{Re}(c_1^*c_2) = \delta, \quad (4.14)$$

montre que δ est constante réelle qu'on peut choisir égale à un ($\delta = 2 \operatorname{Re}(c_1^*c_2) = 1$). Ce choix $\delta = 1$ permet d'identifier les opérateurs $\mathcal{A}(\tau)$ et $\mathcal{A}^+(\tau)$ comme étant des opérateurs d'annihilation et de création respectivement vérifiant la relation de commutation $[\mathcal{A}(\tau), \mathcal{A}^+(\tau)] = 1$.

Aussi, le choix $c_1 = |c_1| \exp(i\mu_1)$ et $c_2 = |c_2| \exp(i\mu_2)$ conduit à

$$|c_2| |c_1| \cos(\mu_2 - \mu_1) = \frac{1}{2}. \quad (4.15)$$

On déduit facilement que

$$\begin{aligned}q &= g^*(\tau)\mathcal{A}(\tau) + g(\tau)\mathcal{A}^+(\tau), \\ ip &= f^*(\tau)\mathcal{A}(\tau) - f(\tau)\mathcal{A}^+(\tau),\end{aligned} \quad (4.16)$$

et ainsi les opérateurs q et p ne dépendent pas de c_1 et c_2 .

4.2 Les états cohérents généralisés dépendent du temps

Bagrov et al [59] ont construits les vecteurs propres $|\alpha, \tau\rangle$ de l'opérateur d'annihilation $\mathcal{A}(\tau)$ avec la valeur propre complexe α

$$\mathcal{A}(\tau) |\alpha, \tau\rangle = \alpha |\alpha, \tau\rangle. \quad (4.17)$$

Les valeurs moyennes des opérateurs q et p dans les états $|\alpha, \tau\rangle$ sont

$$q_c(\tau) = \langle \alpha, \tau | q | \alpha, \tau \rangle = q_0 + p\tau \quad \text{où } q_0 = C_2^* \alpha + C_2 \alpha^*, \quad (4.18)$$

$$p_c(\tau) = \langle \alpha, \tau | p | \alpha, \tau \rangle = i(C_1 \alpha^* - C_1^* \alpha) = p, \quad (4.19)$$

où

$$\alpha = c_1 q_c(\tau) + i g(\tau) p = c_1 q_0 + i c_2 p. \quad (4.20)$$

Dans la représentation des positions q , l'équation aux valeurs propres (4.17) s'écrit

$$\left[c_1 q + g(\tau) \frac{\partial}{\partial q} \right] \Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = \alpha \Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau), \quad (4.21)$$

avec $\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = \langle q | \alpha, \tau \rangle$. La solution générale de cette équation est :

$$\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = \exp \left[-\frac{c_1}{g(\tau)} \frac{q^2}{2} + \frac{\alpha q}{g(\tau)} + \chi(\alpha, \tau) \right], \quad (4.22)$$

où $\chi(\alpha, \tau)$ est une fonction arbitraire de τ et α . Les fonctions $\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau)$ (4.22) peuvent s'écrire en fonction des valeurs moyennes $q(\tau)$ et $p(\tau)$ comme suit :

$$\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = \exp \left[i p q - \frac{c_1}{2g(\tau)} [q - q(\tau)]^2 + \phi(\alpha, \tau) \right] \quad (4.23)$$

où $\phi(\alpha, \tau)$ est une nouvelle fonction de τ et α .

Les fonctions $\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau)$ (4.23) satisfont l'équation suivante

$$S \Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = \lambda(\alpha, \tau) \Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau), \quad (4.24)$$

tel que

$$\lambda(\alpha, \tau) = i \dot{\phi}(\alpha, \tau) - \frac{1}{2} \left[p^2 + \frac{c_1}{g(\tau)} \right]. \quad (4.25)$$

Pour que la fonction $\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau)$ satisfait l'équation de Schrödinger (4.4), Bagrov et al [59] ont supposés que $\lambda(\alpha, \tau) = 0$. Par conséquent, ils obtiennent l'expression de la fonction $\phi(\alpha, \tau)$

$$\phi(\alpha, \tau) = -\frac{i}{2} p^2 \tau - \frac{1}{2} \ln g(\tau) + \ln N, \quad (4.26)$$

où N est une constante de normalisation. Le module au carré de la fonction (4.23) ou densité de probabilité s'écrit

$$\rho(q, \tau) = |\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau)|^2 = \frac{(2\pi)^{-\frac{1}{2}}}{|g(\tau)|} \exp \left\{ -\frac{[q - q(\tau)]^2}{2|g(\tau)|^2} \right\}, \quad (4.27)$$

Les solutions de l'équation de Schrödinger normalisées, sont aussi des fonctions propres de l'opérateur d'annihilation $\mathcal{A}(\tau)$, ont la forme

$$\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}g(\tau)}} \exp \left\{ i \left(pq - \frac{p^2\tau}{2} \right) - \frac{c_1}{g(\tau)} \frac{[q - q(\tau)]^2}{2} \right\}, \quad (4.28)$$

dont la densité de probabilité est

$$\rho_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau) = |\Phi_\alpha^{c_1, 2}(q, \tau)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}|g(\tau)|} \exp \left\{ -\frac{[q - q(\tau)]^2}{2|g(\tau)|^2} \right\}. \quad (4.29)$$

Bagrov et al [59] ont attribués le nom d'états cohérents généralisés dépendants du temps aux solutions (4.28). C'est une famille d'états paramétrés par deux constantes complexes c_1 et c_2 qui satisfont la contrainte $2 \operatorname{Re}(c_1^* c_2) = 1$. Des contraintes supplémentaires sur les constantes c_1 et c_2 transforment ces états en états cohérents de la particule libre.

Ces états cohérents peuvent être aussi obtenu à partir de l'action de l'opérateur de déplacement :

$$D(\alpha, \tau) = \exp [\alpha \mathcal{A}^+(\tau) - \alpha^* \mathcal{A}(\tau)], \quad (4.30)$$

sur l'état du vide $|0, \tau\rangle$ définit par $\hat{A}(\tau) |0, \tau\rangle = 0$, tel que

$$\langle q | \alpha, \tau \rangle = D(\alpha, \tau) \langle q | 0, \tau \rangle = \exp \left(-\frac{|\alpha|^2}{2} \right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle q | n, \tau \rangle, \quad (4.31)$$

avec

$$|n, \tau\rangle = \frac{[\mathcal{A}^+(\tau)]^n}{\sqrt{n!}} |0, \tau\rangle, \quad (4.32)$$

et

$$|0, \tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{2\pi}g(\tau)}} \exp \left(-\frac{C_1}{g(\tau)} \frac{q^2}{2} \right). \quad (4.33)$$

4.3 Relations d'incertitude de Heisenberg

Les écarts quadratiques moyens de $q(\tau)$ et $p(\tau)$ dans les états cohérents sont donnés par

$$\Delta q(\tau) = \sqrt{\langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2} = |g(\tau)|, \quad (4.34)$$

$$\Delta p(\tau) = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = |f(\tau)| = |C_1|. \quad (4.35)$$

Ce qui conduit à

$$\Delta q(\tau)\Delta p(\tau) = i \left[\frac{1}{2} - g(\tau)f^*(\tau) \right]. \quad (4.36)$$

En utilisant la contrainte $2 \operatorname{Re}(c_1^*c_2) = 1$, la relation d'incertitude de Heisenberg (4.36) s'écrit

$$\Delta q(\tau)\Delta p(\tau)|_{2 \operatorname{Re}(c_1^*c_2)=1} = \sqrt{\frac{1}{4} + [|c_2| |c_1| \sin(\mu_2 - \mu_1) + |c_1|^2 \tau]^2} \geq \frac{1}{2}, \quad (4.37)$$

à l'instant initial $\tau = 0$, la relation d'incertitude de Heisenberg (4.37) devient

$$\Delta q\Delta p|_{2 \operatorname{Re}(c_1^*c_2)=1} = \sqrt{\frac{1}{4} + [|c_2| |c_1| \sin(\mu_2 - \mu_1)]^2} \geq \frac{1}{2}. \quad (4.38)$$

Pour minimiser l'incertitude (4.38), il suffit de choisir $\mu_2 = \mu_1 = \mu$, ce qui donne :

$$\Delta q\Delta p = \frac{1}{2}. \quad (4.39)$$

Avec ce choix, la contrainte $2 \operatorname{Re}(c_1^*c_2) = 1$ implique que

$$|c_2| |c_1| = \frac{1}{2} \Rightarrow c_2^* = \frac{c_1^{-1}}{2}. \quad (4.40)$$

Vu que la constante μ ne figure pas dans l'état cohérent (4.28), on peut poser $\mu = 0$ dans ce qui suit, donc

$$\begin{aligned} c_2 &= |c_2| = \Delta q, \\ c_1 &= |c_1| = \Delta p = \frac{1}{2\Delta q}, \\ g(\tau) &= \left(\Delta q + \frac{i\tau}{2\Delta q} \right), \\ \Delta q(\tau) &= |g(\tau)| = \sqrt{\Delta q^2 + \frac{\tau^2}{4(\Delta q)^2}}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

On remarque que les constantes complexes c_1 et c_2 deviennent réelles. Les équations (4.41) montre que le principe d'incertitude de Heisenberg est vérifié à tout instant τ et prend la forme

$$\Delta q(\tau)\Delta p(\tau) = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{\tau^2}{4\Delta q^4}} \geq \frac{1}{2}. \quad (4.42)$$

Enfin, les états cohérents généralisés d'une particule libre sont donnés par

$$\Phi_\alpha^{\Delta q}(q, \tau) = \frac{1}{\sqrt{\left[\Delta q + \frac{i\tau}{2\Delta q}\right]} \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ i \left(pq - \frac{p^2\tau}{2} \right) - \frac{[q - q(\tau)]^2}{\left[4\left(\Delta q^2 + \frac{i\tau}{2}\right)\right]} \right\}. \quad (4.43)$$

Le nombre α est de la forme suivante

$$\alpha = \frac{q_0}{2(\Delta q)} + i(\Delta q)p, \quad (4.44)$$

et la densité de probabilité s'écrit

$$\rho_\alpha^{\Delta q}(q, \tau) = |\Phi_\alpha^{\Delta q}(q, \tau)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\left[(\Delta q)^2 + \frac{\tau^2}{4(\Delta q)^2}\right]} 2\pi} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{[q - q(\tau)]^2}{\Delta q^2 + \frac{\tau^2}{4(\Delta q)^2}} \right\}, \quad (4.45)$$

la densité de probabilité (4.45) est donnée par une distribution gaussienne avec une déviations standard $\Delta q(\tau)$. Les valeurs moyennes de q et p suivent le mouvement classique

$$\begin{aligned} q_c(\tau) &= \langle q \rangle = q_0 + p\tau, \\ p_c(\tau) &= \langle p \rangle = p. \end{aligned}$$

4.4 Les états cohérents généralisés semi-classique d'une particule libre :

Pour discuter la question quel état cohérent généralisé reproduit le mouvement semi-classique de la particule libre, il suffit de retourner aux variables initiales x et t dans (4.3)

$$x(t) = x_0 + \frac{p_x}{m}t \quad \text{et} \quad p = \frac{l}{\hbar}p_x,$$

sachant que

$$\begin{aligned}\Delta x(0) &= l\Delta q(0) = l\Delta x(0) = \Delta x, \\ (\Delta x)^2(t) &= (\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta x)^2}t^2.\end{aligned}$$

La fonction d'onde $\Psi(x, t)$, s'écrit donc en fonction de ces variables

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\left[\Delta x + \frac{i\hbar t}{2m\Delta x}\right]} \sqrt{2\pi}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left(p_x x - \frac{p_x^2 t}{2m} \right) - \frac{[x - x(t)]^2}{4 \left[(\Delta x)^2 + \frac{i\hbar t}{2m} \right]} \right\}, \quad (4.46)$$

et la densité de probabilité sera donnée par

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\left[(\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta x)^2}t^2 \right]} 2\pi} \exp \left\{ -\frac{[x - x(t)]^2}{2 \left[(\Delta x)^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2(\Delta x)^2}t^2 \right]} \right\}. \quad (4.47)$$

La forme (4.47) varie en fonction du temps.

Chapitre 5

Les états cohérents généralisés d'une particule libre : invariant hermitique

Dans ce chapitre, nous allons étudier des états de type Gaussien qui reproduisent le comportement classique d'une particule libre localisée que nous appellerons "état cohérent d'une particule libre" car la structure Gaussienne de l'état reste conservé au cours du temps. Cette étude se base sur la notion d'invariants linéaires mais hermitiques.

5.1 Dérivation d'un invariant linéaire hermitique

Le problème est de trouver les solutions de l'équation de Schrödinger (1.19) pour une particule libre de masse constante m décrite par l'Hamiltonien

$$H(p, x, t) = \frac{p^2}{2m} \quad (5.1)$$

dont solutions classiques $x_c(t)$ et $p_c(t)$ sont données par

$$x_c(t) = x_0 + \frac{p_0}{m}t, \quad (5.2)$$

$$p_c(t) = p_0. \quad (5.3)$$

Nous supposons que l'opérateur invariant $I(t)$ s'écrit sous la forme linéaire en p et x suivante

$$I(t) = A(t)p + B(t)x + C(t), \quad (5.4)$$

où $A(t)$, $B(t)$ et $C(t)$ sont des coefficients réels dépendants du temps. L'opérateur $I(t)$ est hermitien et satisfaisant l'équation de Liouville-Von Neumann (1.2). La substitution des équations (5.1) et (5.4) dans l'équation (1.2) donne

$$\begin{aligned} A(t) &= A_0 - \frac{B_0}{m}t, \\ B(t) &= B_0, \\ C(t) &= C_0, \end{aligned}$$

où A_0 , B_0 et C_0 sont des constantes réelles arbitraires. Les états propres $\varphi_\lambda(x, t)$ de $I(t)$ sont les solutions de l'équation aux valeurs propres

$$I(t) \varphi_\lambda(x, t) = \lambda \varphi_\lambda(x, t). \quad (5.5)$$

Les solutions $\varphi_\lambda(x, t)$ de l'équation (5.5) sont de la forme

$$\varphi_\lambda(x, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{2(\lambda - C_0)x - B_0x^2}{2A(t)} \right) \right]. \quad (5.6)$$

La solution $\Psi_\lambda(x, t)$ de l'équation de Schrödinger n'est rien d'autre que l'état propre (5.6) de l'opérateur invariant multiplié par un facteur de phase $\exp[i\alpha_\lambda(t)]$ où

$$\alpha_\lambda(t) = - \int_0^t \frac{(\lambda - C_0)^2}{2m\hbar A^2(t')} dt' + i \ln \left(\sqrt{\frac{A(t)}{A_0}} \right). \quad (5.7)$$

Donc

$$\Psi_\lambda(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar A(t)}} \exp \left(-i \int_0^t \frac{(\lambda - C_0)^2}{2m\hbar A^2(t')} dt' \right) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{2(\lambda - C_0)x - B_0x^2}{2A(t)} \right) \right]. \quad (5.8)$$

Notons que ces solutions correspondent à des ondes planes non localisées. Comme nous l'avons mentionné au premier chapitre, relation (1.10), on peut toujours trouver une solution générale de l'équation de Schrödinger sous forme d'une combinaison linéaire des solutions particulières. En construisant un paquet d'ondes Gaussien, Ces solutions quantiques d'ondes localisées seront définies, dans la section suivante.

5.2 Solution générale localisée

La fonction d'onde générale $\Psi(x, t)$ solution générale de l'équation de Schrödinger en terme de paquet d'ondes Gaussien s'écrit sous forme d'un combinaison linéaire des solutions (5.8)

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \Psi_{\lambda}(x, t) d\lambda, \quad (5.9)$$

où $g(\lambda)$ est une fonction poids qui détermine l'état du système de telle manière que $\Psi(x, t)$ sera de carré sommable. On choisit la fonction poids $g(\lambda)$ sous forme d'une Gaussienne

$$g(\lambda) = \sqrt{\frac{\sqrt{a}}{\hbar A_0 \pi \sqrt{2\pi}}} \exp(-a(\lambda - I_0)^2) \exp\left[\frac{-i a_0}{\hbar A_0} \left(\lambda - \frac{I_0}{2}\right)\right], \quad (5.10)$$

avec a , a_0 et I_0 des constantes réelles positives.

En substituant les équations (5.8) et (5.10) dans l'équation (5.9) et en effectuant le changement de variable $\lambda \rightarrow \lambda + I_0$, pour calculer l'intégrale, nous obtenons la solution sous forme d'un paquet d'onde Gaussien normalisé

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \sqrt{\sqrt{a} \left[\hbar A(t) \sqrt{2\pi} \left(a + i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right) \right]^{-1}} \exp\left(\frac{-i I_0 a_0}{\hbar 2 A_0}\right) \\ & \times \exp\left(-i \int_0^t \frac{(C_0 - I_0)^2}{2m\hbar A^2(t')} dt'\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{-2(C_0 - I_0)x - B_0 x^2}{2A(t)}\right)\right] \\ & \times \exp\left[-\frac{\left[x - A(t) \left(-\int_0^t \frac{(C_0 - I_0)}{m A^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0}\right)\right]^2}{4\hbar^2 A^2(t) \left(a + i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt'\right)}\right], \end{aligned} \quad (5.11)$$

Nous pouvons établir la relation classique et quantique de la particule libre, à travers les caractéristiques de cette fonction d'onde.

5.3 Analyse quantique du système

La valeur moyenne d'un opérateur arbitraire O est par définition

$$\langle O \rangle = \int \Psi^*(x, t) O \Psi(x, t) dx. \quad (5.12)$$

Pour réécrire la solution (5.11) sous une forme plus élégante, on va calculer les valeurs moyennes des variables canoniques x , p et leurs carrés dans l'état $\Psi(x, t)$. La valeur moyenne de x est

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \\ \langle x \rangle &= \sqrt{\frac{a}{\hbar^2 A^2(t) 2\pi \left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)}} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp \left[-\frac{a \left[x - A(t) \left(-\int_0^t \frac{(C_0 - I_0)}{m A^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0} \right) \right]^2}{2\hbar^2 A^2(t) \left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)} \right] dx. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Le calcul de cette intégrale nous impose le changement de variable $x \rightarrow x + A(t) \left(-\int_0^t \frac{(C_0 - I_0)}{m A^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0} \right)$, ce qui conduit à

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \left\{ \frac{a}{\hbar^2 A^2(t) 2\pi \left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)} \right\}^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[x + A(t) \left(-\int_0^t \frac{(C_0 - I_0)}{m A^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0} \right) \right] \\ &\quad \times \exp \left[-\frac{a x^2}{2\hbar^2 A^2(t) \left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)} \right] dx. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Une fois l'intégration effectuée, on trouve la position classique $x_c(t)$

$$\langle x \rangle = x_c(t) = a_0 - \frac{C_0}{m A_0} t. \quad (5.15)$$

De la même manière la valeur moyenne de p dans l'état $\Psi(x, t)$:

$$\begin{aligned} \langle p \rangle = & \left\{ \frac{a}{\hbar^2 A^2(t) 2\pi \left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)} \right\}^{\frac{1}{2}} \\ & \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2(C_0 - I_0) - 2B_0 x}{2A(t)} + 2\hbar i \frac{\left[x - A(t) \left(-\int_0^t \frac{(C_0 - I_0)}{mA^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0} \right) \right]}{4\hbar^2 A^2(t) \left(a + i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right)} \right) \\ & \times \exp \left[-\frac{a \left[x - A(t) \left(-\int_0^t \frac{(C_0 - I_0)}{mA^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0} \right) \right]^2}{2\hbar^2 A^2(t) \left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)} \right] dx, \end{aligned} \quad (5.16)$$

donne

$$\langle p \rangle = -\frac{C_0}{A_0}, \quad (5.17)$$

Pour plus de commodité, on a posé $I_0 = B_0 a_0$.

De la même manière, on peut calculer les valeurs moyennes des opérateurs x^2 et p^2 dans l'état $\Psi(x, t)$:

$$\langle x^2 \rangle = \langle x \rangle^2 + \frac{\left[\hbar^2 A^2(t) \left\{ a^2 + \left(\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right)^2 \right\} \right]}{a}, \quad (5.18)$$

$$\langle p^2 \rangle = \langle p \rangle^2 + \frac{1}{(\Delta x)^2} \left[\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{t}{4amA_0A(t)} - \frac{B_0}{A(t)} (\Delta x)^2 \right)^2 \right]. \quad (5.19)$$

Par conséquent, on obtient les écarts quadratiques moyens Δx et Δp comme suit :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \frac{\hbar A(t)}{\sqrt{a}} \sqrt{a^2 + \left(\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right)^2}, \quad (5.20)$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{1}{\Delta x} \sqrt{\left[\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{t}{4amA_0A(t)} - \frac{B_0}{A(t)} (\Delta x)^2 \right)^2 \right]}. \quad (5.21)$$

qui montre que le principe d'incertitude de Heisenberg est vérifié

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\left[\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{t}{4amA_0A(t)} - \frac{B_0}{A(t)} (\Delta x)^2 \right)^2 \right]} \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (5.22)$$

Cette dernière relation est représentée sur la figure (1)

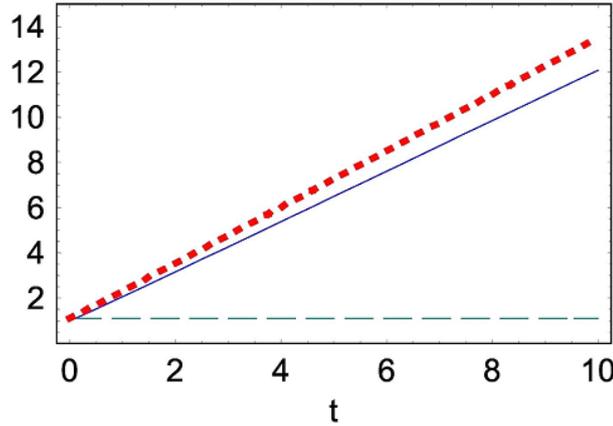


Figure 1 : Le comportement temporel de l'incertitude de Heisenberg exprimée dans l'équation (5.22) (graphe pointillé gras rouge), ainsi que Δx (graphe bleu), et Δp (graphe vert) . On a utilisé $a = 1$, $A_0 = 1$, $B_0 = 1$, $m = 1$ et $\hbar = 1$.

On peut s'exprimer le paquet d'onde $\Psi(x, t)$ en fonction de $\langle x \rangle$ et $\langle p \rangle$:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \sqrt{\frac{\hbar A(t) \left(a - i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right)}{\sqrt{2\pi a} (\Delta x)^2}} \exp \left[-\frac{i}{2\hbar} \left(\frac{I_0 C_0}{A_0 B_0} + \langle p \rangle \langle x \rangle \right) \right] \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x \right] \\ & \times \exp \left\{ -\left[\frac{i}{\hbar} \frac{B_0}{2A(t)} + \frac{1}{4a (\Delta x)^2} \left(a - i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right) \right] [x - \langle x \rangle]^2 \right\} \quad (5.23) \end{aligned}$$

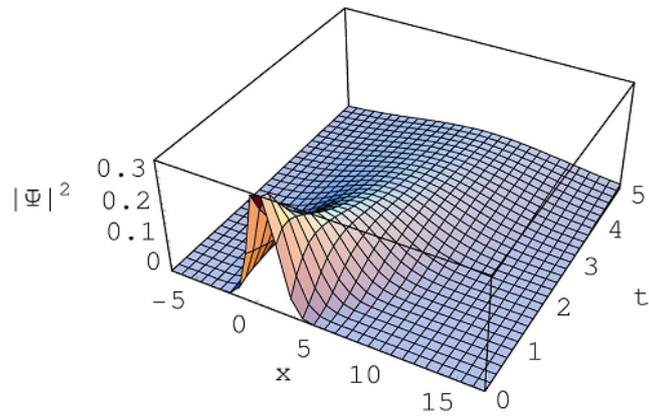
La densité de probabilité associé à ce paquet d'ondes Gaussien est donné par

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{\hbar A(t) \sqrt{a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2}}{\sqrt{2\pi a} (\Delta x)^2} \exp \left\{ -\frac{[x - \langle x \rangle]^2}{2 (\Delta x)^2} \right\}.$$

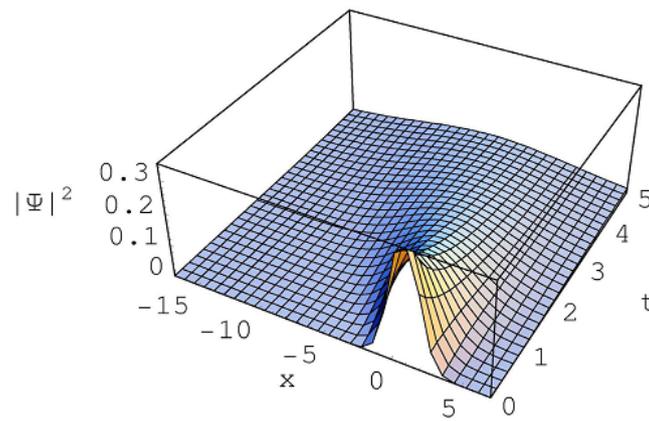
En utilisant le fait que $\Delta x = \frac{\hbar A(t)}{\sqrt{a}} \sqrt{\left(a^2 + \left[\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right]^2 \right)}$, nous pouvons réécrire la densité de probabilité comme suit

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \exp \left\{ -\frac{[x - \langle x \rangle]^2}{2 (\Delta x)^2} \right\}. \quad (5.24)$$

Qui montre que cette densité de probabilité n'est rien d'autre qu'une Gaussienne de largeur Δx et de variance $(\Delta x)^2$. L'équation (5.24) montre qu'un paquet d'onde Gaussien reste Gaussien au cours du temps. La densité de probabilité $|\Psi(x, t)|^2$ est représentée dans les figure 2.



(a)



(b)

Figure. 2 : L'évolution temporelle de la densité de probabilité $|\Psi(x, t)|^2$: On a fixé les constantes $a = 1, A_0 = 1, B_0 = -1, m = 1, a_0 = 1, \hbar = 1$ et $C_0 = -1$ dans la figure (a) et $C_0 = 1$ dans la figure (b).

La figure (2.a) correspond la densité de probabilité d'une particule libre en mouvement le long de la direction positif, tandis que (2.b) pour une particule en mouvement le long de la direction négatif. C'est une Gaussienne localisé autour de la solution classique $\langle x \rangle = x_c(t)$.

Une question naturelle vient à l'esprit : pourrait on obtenir la solution (5.23) à partir de l'action de l'opérateur déplacement sur l'état fondamental? La reponse est oui car l'expression de la fonction d'onde $\Psi(x, t)$ (5.23) s'obtient à partir de l'application de l'opérateur déplacement $D(\alpha, t)$

$$D(\alpha, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\langle p \rangle x - \langle x \rangle p) \right], \quad (5.25)$$

sur l'état du vide $\Psi_0(x, t)$ qui correspond à une particule au repos $\langle p \rangle = 0$ et à l'origine $\langle x \rangle = 0$

$$\Psi_0(x, t) = \Psi(x, t) |_{\langle x \rangle=0, \langle p \rangle=0}, \quad (5.26)$$

$$D(\alpha, t) \Psi_0(x, t) = \Psi(x, t), \quad (5.27)$$

l'opérateur déplacement a les propriétés suivantes :

$$D^+(\alpha, t) x D(\alpha, t) = x + x_c \quad (5.28)$$

$$D^+(\alpha, t) p D(\alpha, t) = p + p_c \quad (5.29)$$

Etant donné que le mouvement classique est reproduit à l'aide du paquet d'onde Gaussien et cette solution s'obtient par l'action de l'opérateur déplacement sur l'état du vide, on peut leur attribué le nom d'états cohérents généralisés à la solution (5.27) obtenue sous forme de paquet d'onde Gaussien.

Conclusion

En mécanique quantique, la tâche la plus primordiale, lorsque l'on étudie les propriétés quantiques d'un système, est la résolution de l'équation de Schrödinger. Cette tâche consiste à séparer la partie temporelle de la partie spatiale dans l'équation de Schrödinger. La résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps conduit aux fonctions d'ondes représentant les états propres et le spectre d'énergie du système. Pour une particule libre, les états propres sont des ondes planes entièrement délocalisées et ne peuvent pas être normalisés.

Dans cette thèse nous avons défini les états cohérents de la particule libre. Notre démarche s'appuie sur les invariants linéaires Hermitiques contrairement à la méthode utilisée par les auteurs de la référence [59] qui utilisent un invariant dépendant du temps non Hermitique linéaire en p et x . Nous rappelons que selon la théorie de Lewis et Riesenfeld [33], un invariant est un opérateur qui doit nécessairement satisfaire trois exigences : a) il est Hermitique. b) Il satisfait l'équation de Von Neumann. c) Ses valeurs propres sont réelles et indépendantes du temps.

L'invariant utilisé dans [59] ne vérifie ces trois propriétés, De plus ils imposent trop de contraintes pour obtenir les états cohérents de la particule libre.

Notre travail est critique vis à vis de celui des auteurs de la référence [59] dans la mesure où les solutions de l'équation de Schrödinger obtenues sur la combinaison des fonctions propres d'un invariant linéaire hermitique ont une forme Gaussienne et évoluent au cours du temps tout en restant Gaussien. Ces paquets d'onde Gaussiens vérifient toutes les propriétés relatives aux états cohérents .

- i) ils reproduisent l'évolution classique.
- ii) sont fonctions propres d'un opérateur annihilation qui pourra être déterminé plus tard.
- iii) s'obtiennent à partir de l'action de $D(\alpha, t) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\langle p \rangle x - \langle x \rangle p) \right]$

Bibliographie

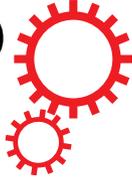
- [1] C. C. tannoudji, B. diu and F. laloë – Mécanique quantique – T1 et T2 – Hermann, Paris, nouvelle édition revue, corrigée et augmentée 1977.
- [2] M. le bellac, C.C. tannoudji and F.laloë - Physique quantique - T1.
- [3] A. messiah - Mécanique quantique - édition Dunod. (Paris, 1995).
- [4] E. Schrödinger, Naturwissenschaften 14 (1926) 664.
- [5] L. D. landau and E. lifchitz – Mécanique quantique – traduit du russe par Edouard Gloukhian, Mir, Moscou, 2ème édition (1967).
- [6] N. zettilli – Quantum machanics - Concepts and Application-Wiley (2009).
- [7] P. Caldirola, Nuovo Cimento 440 18 (1941) 393.
- [8] E. Kanai, Prog. Theor. Phys. 3 (1948) 440.
- [9] K. Husimi, Prog. Theor. Phys. 9 (1953) 381.
- [10] D. M. Greenberger, J. Math. Phys. 15 (1974) 395.
- [11] R. W. Hasse, J. Math. Phys. 16 (1975) 2005.
- [12] D. C. Khandekar and S. V. Lawande, J. Math. Phys. 16 (1975) 384; *ibid.* 20 (1979) 1870.
- [13] A. D. Jannussis, G. N. Brodimas and A. Streclas, Phys. Lett. A74 (1979) 6.
- [14] H. Dekker, Phys. Rev. 80 (1981) 1.
- [15] R. Vaidyanathan, J. Math. Phys. 23 (1982) 1346.
- [16] M. S. Abdalla and R. K. Colegrave, Phys. Rev. A32 (1985) 1958.
- [17] J. M. Cervero and J. D Lejarreta , J. Phys. A22 (1989) L663.
- [18] L. S. Brown, Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 527.

-
- [19] G. S. Agarwal and S. A. Kumar, *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 3665.
- [20] C. M. A. Dantas, I. A. Pedrosa and B. Baseia, *Phys. Rev.* A45 (1992) 1320.
- [21] J. Y. Ji, J. H. Kim, S. P. Kim and K. S. Soh, *Phys. Rev.* A52 (1995) 3352; J. Y. Ji, J. Kim and S. P. Kim, *Phys. Rev.* A51 (1995) 4268.
- [22] M. Maamache, *J. Phys.* A29 (1996) 2833; M. Maamache, K. Bencheikh and H. Hachemi, *Phys. Rev.* A59 (1999) 3124; M. Maamache and H. Choutri, *J. Phys.* A33 (2000) 6203; M. Maamache and H. Bekkar, *J. Phys.* A36 (2003) L359.
- [23] Y. C. Ge and M. S. Child, *Phys. Lett.* 78 (1997) 2507.
- [24] A. Mostafazadeh, *Phys. Rev.* A55 (1997) 4084.
- [25] J. Lie, B. Hu and B. Li, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 1749.
- [26] A. V. Zhukov, *Phys. Lett.* A256 (1999) 325.
- [27] D. Y. Song, *Phys. Rev.* A59 (1999) 2616.
- [28] M. Feng, *Phys. Rev.* A64 (2001) 034101.
- [29] J. Bauer, *Phys. Rev.* A65 (2002) 036101.
- [30] J. R. Choi and B. H. Kweon, *Int. J. Mod. Phys.* B16 (2002) 4733.
- [31] S. Mandal, *Phys. Lett.* A331 (2004) 308.
- [32] C. I. Um, K. H. Yeon and T. F. George, *Phys. Rep.* 362 (2002) 63.
- [33] H. R. Lewis, Jr and W. B. Riesenfeld, *J. Math. Phys.* 10 (1969) 1458.
- [34] J. R. Ray and J. L. Reid, *Phys. Lett.* A71 (1979) 317.
- [35] J. G. Hartley and J. R. Ray, *Phys. Rev.* A25 (1982) 2388.
- [36] M. Lutzky, *Phys. Lett.* A68 (1978) 3.
- [37] I. A. Pedrosa, *J. Math. Phys.* 28 (1987) 2662; I. A. Pedrosa, *Phys. Rev.* A55 (1997) 3219; I. A. Pedrosa, G. P. Serra and I. Guedes, *Phys. Rev.* A56 (1997) 4300.
- [38] D. A. Molares, *J. Phys.* A21 (1988) L889.
- [39] N. Datta, G. Ghosh and M. H. Engineer, *Phys. Rev.* A40 (1989) 526.
- [40] X. C. Gao, J. B. Xu and T. Z. Qian, *Ann. Phys.* 204 (1990) 235; *ibid.* *Phys. Rev.* A44 (1991) 7016.

- [41] M. Maamache, Phys. Rev. A52 (1995) 936; Phys. Scr. 54 (1996) 21; M. Maamache, J. P. Provost and G. Vallée, Phys. Rev. A59 (1999) 1777; M. Maamache, Phys. Rev. A61 (2000) 026102.
- [42] D. B. Monteoliva, H. J. Korsh and J.A. Nunez, J. Phys. A : Math. Gen. 27 (1994) 6897.
- [43] Y. Z. Lai, J. Q. Liang, H. J. W. Muller-Kirsten and J. G. Zhou, Phys. Rev. A53 (1996) 369.
- [44] R.S. Kaushal and D. Parashar, Phys. Rev. A55 (1997) 2610.
- [45] V. V. Dodonov, V. I. Man'ko and L. Rosa, Phys. Rev. A57 2851 (1998).
- [46] D. Trifonov, J. Phys. A : Math. Gen. 32 (1999) 3649.
- [47] I. Guedes, Phys. Rev. A63 (2001) 034102.
- [48] H. Bekkar, F. Benamira and M. Maamache, Phys. Rev. A68 (2003) 016101.
- [49] R. R. Landim and I. Guedes, Phys. Rev. A61 (2000) 054101.
- [50] A. S. de Castro and A. de Souza Dutra, Phys. Rev. A67 (2003) 054101.
- [51] I. A. Pedrosa, Mod. Phys. Lett. B18 (2004) 1267; I. A. Pedrosa, A. Rosas and I. Guedes, J. Phys. A38 (2005) 7757; A. L. de Lima, A. Rosas and I. A. Pedrosa, Annals of Physics 323 (2008) 2253.
- [52] R. J. Glauber, Phys. Rev. 130 (1963) 2529; Phys. Rev. Lett. 10 (1963) 84; Phys. Rev. 131 (1963) 2766.
- [53] J. R. Klauder, J. Math. Phys. 4 (1963) 1055; J. Math. Phys. 4 (1963) 1058.
- [54] P. Carruthers and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. 40 (1968) 411.
- [55] M. M. Nieto and Jr. L. M. Simmons, Phys. Rev. Lett. 41 (1968) 207; *ibid.* Phys. Rev. A19 (1979) 438, *ibid.* Phys. Rev. D20 (1979) 1342, *ibid.* Phys. Rev. D22 (1980) 391.
- [56] J. G. Hartley and J. R. Ray, Phys. Rev. D25 (1982) 382.
- [57] J. R. Ray, Phys. Rev. D25 (1982) 3417.
- [58] I. A. Pedrosa, Phys. Rev. D36 (1987) 1279.
- [59] V. G. Bagrov, D. M. Gitman and A. S. Pereira, Phys.-Usp57 (2014) 891.
- [60] V. V. Dodonov, I. A. Malkin and V. I. Man'ko, Physica, 72 (3) (1974) 597.

- [61] V. V. Dodonov and V. I. Man'ko, *Phys. Rev. A* 20 (1979) 550.
- [62] V. G. Bagrov, D. M. Gitman, E. S. Macedo and A. S. Pereira, *J. Phys. A : Math. Theor.* 46 (2013) 325305.
- [63] V. G. Bagrov, D. M. Gitman and A. S. Pereira. *Braz. J. Phys.* 45 (2015) 369.

SCIENTIFIC REPORTS



OPEN

Analyzing generalized coherent states for a free particle

Mustapha Maamache¹, Abderrezak Khatir^{1,2}, Halim Lakehal¹ & Jeong Ryeol Choi³

Received: 30 January 2016

Accepted: 06 July 2016

Published: 11 August 2016

Despite the didactic importance of a free particle in quantum mechanics, its coherent state analysis has long been untouched. It is only recently that it has been noticed and studied in the semiclassical domain. While the previously known solutions, reported by Bagrov *et al.* for a free particle, are described using the linear non-Hermitian invariant operator, we show in this work that the general solution of the Schrödinger equation can also be naturally derived using a simpler method based on an Hermitian linear invariant operator. According to this, an exact Gaussian wave function that corresponds to a coherent state solution is obtained. An interpretation for such general quantum solution designated within the Lewis-Riesenfeld framework is provided and, further, quantum-classical correspondence principle for the system is reexamined.

The derivation of the Schrödinger solutions is the most central task when we investigate quantum properties of a specific system. The usual method for obtaining Schrödinger solutions is the separation of variables method that is based on mathematical techniques separating out the time function from the Schrödinger equation. Solving the time-independent Schrödinger problem leads to derive analytically the wave functions representing the energy eigenstates (and the corresponding eigenvalues) of a given problem. Although this simple method is valid for a free particle, the eigenstates of the corresponding Hamiltonian cannot be normalizable. These states correspond to plane waves which are fully delocalized. In this work, we will study Gaussian-like states describing the semiclassical time behavior of a localized free-particle. For the sake of brevity, we will call them “coherent state of a free particle” since the Gaussian structure of the state is preserved during the time evolution.

However, such unnormalizable solutions can be customarily superimposed to be localized solutions by means of a Fourier transformation. Notice that the localized solutions derived in this way are no longer eigenstates of the Hamiltonian although they satisfy the Schrödinger equation. One of the simplest examples for this procedure is to construct the Gaussian wave packets that correspond to the coherent states which describe the semiclassical motion of a localized particle.

A class of the well known coherent states is those of the simple harmonic oscillator^{1–4}; they were originally obtained by Schrödinger¹ as specific quantum states, where the expectation values of the position and momentum operators in these states were the same as the corresponding classical solutions. These states have a number of other interesting properties including the followings: (a) They are eigenstates of the destruction operator; (b) They are created from the ground state by a unitary operator; (c) They minimize the uncertainty relations and do not spread over time; (d) They are (over)complete and normalized, but not orthogonal. These properties have been fully demonstrated in the literature^{5–11}. Thus, the definition and properties of the coherent states for the simple harmonic oscillator are well understood in the context of theoretical physics.

However, despite the didactic importance of analyzing quantum characteristics of a free particle as well as that of the harmonic oscillator, coherent states of a free particle have not been extensively investigated because of the difficulties in deriving their explicit analytical forms. It has been shown that the group-theoretic approach to the time evolution of quantum states is equivalent to the corresponding Lewis-Riesenfeld approach and the free-particle dynamics can be reproduced from the dynamics of the time-dependent harmonic oscillator by letting $\omega(t) \rightarrow 0$ for $t \rightarrow \infty$ ¹². It is only recently that quantum dynamics of a free particle has been noticed and the time behavior of its semiclassical wave packets has been studied^{13–16}.

In ref. 13, Bagrov *et al.* constructed coherent states for a free particle as Gaussian wave packets that allow one to establish a natural relation between the classical and quantum descriptions of a free particle. They used essentially an invariant operator method by introducing a non-Hermitian time-dependent linear invariant described in

¹Laboratoire de Physique Quantique et Systèmes Dynamiques, Faculté des Sciences, Université Ferhat Abbas Sétif 1 Sétif 19000, Algeria. ²Faculté des Sciences Exactes, Université des Frères Mentouri, Constantine, Route d'Ain El Bey, Constantine, Algeria. ³Department of Radiologic Technology, Daegu Health College, Yeongsong-ro 15, Buk-gu, Daegu 41453, Republic of Korea. Correspondence and requests for materials should be addressed to J.R.C. (email: choiardor@hanmail.net)

terms of momentum p and position operators x ¹⁷. In the approach based on such a non-Hermiticity assumption (NHA) for the invariant operator, a time-dependent generalized coherent state can be derived by solving the eigenvalue equation of the non-Hermitian linear invariant (or of the non-Hermitian linear integrals of motion) under some constraints on the parameters and constants¹³. For other papers exploiting similar techniques for deriving Schrödinger solutions of specific systems, you can refer to refs 18–20.

Recall that, according to the theory of Lewis and Riesenfeld²¹, an invariant is an operator that must necessarily satisfy three requirements: (a) It is Hermitian; (b) It satisfies the von Neumann equation; (c) Its eigenvalues are real and time-*independent*. Furthermore, any invariant satisfying these three requirements leads to a complete set of solutions of the corresponding Schrödinger equation. So, a conventional solution is constructed as a linear combination of these solutions. In general, any two different Lewis-Riesenfeld Hermitian invariants lead to two different sets of solutions. However, each solution of one of the invariants can be written as a linear combination of the solutions of the second one. Considering the above properties of the Hermitian linear invariant operator, we will show that the Gaussian wave packet and all the results for the coherent states of a free particle can be obtained by using the Hermitian invariant operator which is linear in p and x . It should be noted that this linear invariant operator can be applied not only for the free particle, but also for other systems that are quadratic in p and x such as the harmonic oscillator^{18,19,22}.

In the present paper, we propose an alternative and simpler method for deriving Schrödinger solutions for the motion of a free particle on the basis of a Hermiticity assumption (HA) for the linear invariant operator. The merit of the research using HA is that we can derive complete quantum solutions of the system without imposing any conditions on the parameters necessary for defining the invariant; we will show that this method leads to obtaining the Gaussian wave packet (the solutions of the Schrödinger equation) for the system.

Materials and Methods

From the Hamiltonian of a free particle, the Hermitian linear invariant operator of the system will be constructed. Plane wave solution $\varphi_\lambda(x, t)$ of the eigenvalue equation of the invariant operator will be derived from a straightforward evaluation. From the theory of the Lewis-Riesenfeld²¹, one can confirm that the wave function $\psi_\lambda(x, t)$ of the system can be represented in terms of this plane wave solution, i.e., $\psi_\lambda(x, t) = N_0 \varphi_\lambda(x, t) \exp[i\alpha_\lambda(t)]$, where N_0 is a normalization constant and $\alpha_\lambda(t)$ is a time-dependent phase. With the aid of the Schrödinger equation, we will determine the analytical form of $\alpha_\lambda(t)$. We then have the complete wave function $\psi_\lambda(x, t)$ which corresponds to the plane wave.

To obtain the Gaussian-type wave function $\Psi(x, t)$, we will introduce a suitable weight function $g(\lambda)$. Then, through the integration $\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \psi_\lambda(x, t) d\lambda$, the Gaussian wave function $\Psi(x, t)$ which satisfies the Schrödinger equation will be derived. Finally, quantum characteristics of the free particle will be analyzed by making use of $\Psi(x, t)$.

Results

Invariant and the generalized coherent state. Let us consider a free particle that travels with a momentum p . To study the quantum properties of this system, it is necessary to find the solutions of the Schrödinger equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(x, p, t) \psi(x, t), \quad (1)$$

with Hamiltonian $H(x, p, t)$ of the form

$$H(x, p, t) = \frac{1}{2m} p^2. \quad (2)$$

As mentioned in the introductory section, the customarily obtained solutions of Eq. (1) with Eq. (2) are delocalized ones. This delocalization leads to a continuous energy spectrum for the system; in this case, the construction of the coherent state is not an easy task. To overcome this difficulty, we introduce an invariant operator and derive its eigenstate which is localized at a position. The eigenstate $\varphi_\lambda(x, t)$ obtained in this way is almost the same as a certain Schrödinger solution $\psi_\lambda(x, t)$. In fact, the difference between them is just a multiplication by a phase factor $\exp[i\alpha_\lambda(t)]$ (see Materials and Methods section). This leads to a localized Schrödinger solution (a generalized quantum solution) that corresponds to the coherent state.

We shall utilize the Lewis-Riesenfeld method²¹ in order to obtain the generalized quantum solutions for the time behavior of the system in the configuration space. To proceed our theory, it is necessary to find an invariant operator $I(t)$ satisfying the identity

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [I, H] = 0. \quad (3)$$

Clearly, the meaning of this equation is equivalent to saying that, if $\varphi_\lambda(x, t)$ is an eigenfunction of $I(t)$ with a time-*independent* eigenvalue λ , we can find a solution of the Schrödinger equation in the form $\psi_\lambda(x, t) = \exp[i\alpha_\lambda(t)] \varphi_\lambda(x, t)$, where $\alpha_\lambda(t)$ satisfies the eigenvalue equation for the Schrödinger operator:

$$\hbar \dot{\alpha}_\lambda(t) \varphi_\lambda = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right] \varphi_\lambda. \quad (4)$$

Following ref. 13, we suppose that the solution of Eq. (3) takes the form

$$I(t) = A(t)p + B(t)x + C(t), \tag{5}$$

where $A(t)$, $B(t)$, and $C(t)$ are time-dependent coefficients that will be determined. From the substitution of Eqs. (2) and (5) in Eq. (3), we have the time-dependent coefficients such that

$$A(t) = A_0 - \frac{B_0}{m}t, \quad B(t) = B_0, \quad \text{and } C(t) = C_0, \tag{6}$$

where A_0 , B_0 , and C_0 are arbitrary real constants.

The eigenstates $\varphi_\lambda(x, t)$ of $I(t)$ are the solutions of the equation

$$I(t)\varphi_\lambda(x, t) = \lambda\varphi_\lambda(x, t), \tag{7}$$

where the corresponding eigenvalues λ are time-independent. We can show that the solutions $\varphi_\lambda(x, t)$ of Eq. (7) are of the form

$$\varphi_\lambda(x, t) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{2(\lambda - C_0)x - B_0x^2}{2A(t)}\right)\right]. \tag{8}$$

Substituting Eq. (8) into Eq. (4) and executing the integration, we obtain

$$\alpha_\lambda(t) = \alpha_\lambda(0) - \int_0^t \frac{(\lambda - C_0)^2}{2m\hbar A^2(t')} dt' + i \ln\left[\sqrt{\frac{A(t)}{A_0}}\right]. \tag{9}$$

Here, the first relation in Eq. (6) is used. Notice that the logarithmic term in the above equation decreases as the time increases. We now confirm that the time-dependent normalized wave functions $\psi_\lambda(x, t)$ can be written as

$$\psi_\lambda(x, t) = N_0 \exp[i\alpha_\lambda(t)] \varphi_\lambda(x, t). \tag{10}$$

From the normalization condition for the Dirac delta function, $\langle \psi_\lambda | \psi_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda')$, we have the normalization factor as $N_0 = \sqrt{(2\pi\hbar A_0)^{-1}}$. Therefore the physical orthogonal wave functions $\psi_\lambda(x, t)$, which are solutions of the Schrödinger equation (1), are given by

$$\psi_\lambda(x, t) = N(t) \exp\left[-i \int_0^t \frac{(\lambda - C_0)^2}{2m\hbar A^2(t')} dt'\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{2(\lambda - C_0)x - B_0x^2}{2A(t)}\right)\right], \tag{11}$$

where we have taken $\alpha_\lambda(0) = 0$ and the new normalization factor is given by $N(t) = \sqrt{[2\pi\hbar A(t)]^{-1}}$.

Furthermore, the general wave function $\Psi(x, t)$ is then written as

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \psi_\lambda(x, t) d\lambda, \tag{12}$$

where $g(\lambda)$ is a weight function which determines the state of the system in a way that $\Psi(x, t)$ becomes square integrable, i.e., that the integration $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx$ becomes a time-independent finite constant. Any suitable choice of $g(\lambda)$ yields a conventional solution as the Gaussian wave-packet function. Let us now choose the weight function as a Gaussian form too:

$$g(\lambda) = \sqrt{\frac{\sqrt{a}}{\hbar A_0 \pi \sqrt{2\pi}}} \exp(-a(\lambda - I_0)^2) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \frac{a_0}{A_0} \left(\lambda - \frac{I_0}{2}\right)\right], \tag{13}$$

where a , a_0 , and I_0 are positive real constants.

Substituting Eqs. (11) and (13) into Eq. (12) and accomplishing the integration by changing the integration variable without loss of generality as $\lambda \rightarrow \lambda + I_0$, we obtain the normalized Gaussian wave function in the form

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & N_\Psi(t) \exp\left[-i \int_0^t \frac{(C_0 - I_0)^2}{2m\hbar A^2(t')} dt'\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \frac{I_0 a_0}{2 A_0}\right] \\ & \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\frac{-2(C_0 - I_0)x - B_0x^2}{2A(t)}\right)\right] \\ & \times \exp\left[-\frac{\left[x - A(t)\left(-\int_0^t \frac{C_0 - I_0}{mA^2(t')} dt' + \frac{a_0}{A_0}\right)\right]^2}{4\hbar^2 A^2(t)\left(a + i \int_0^t \frac{1}{2\hbar mA^2(t')} dt'\right)}\right], \end{aligned} \tag{14}$$

where $N_\Psi(t) = \sqrt{\sqrt{a} [\hbar A(t) \sqrt{2\pi} (a + i \int_0^t \frac{1}{2\hbar mA^2(t')} dt')]^{-1}}$. We can establish a natural relation between the classical and quantum descriptions of free particles by taking advantages of the characteristics of this wave function.

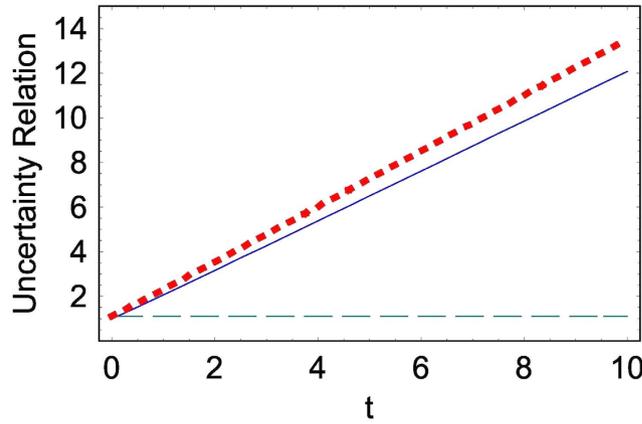


Figure 1. Time evolution of the uncertainty relation, $\Delta x \Delta p$ (thick dotted line). We also represented Δx (solid line) and Δp (dashed line). We have used $a = 1, A_0 = 1, B_0 = -1, m = 1,$ and $\hbar = 1$.

For the case $B_0 = 0$ as a particular example, the time-dependent invariant reduces to a simple one that is linear only in p while it has nothing to do with x . If we further impose $I_0 = 0$, our wave function given in Eq. (14) reduces to those of the well-known “localized states” that describe a free particle as the product of a plane wave and a Gaussian state that has been derived in the most textbooks of quantum mechanics (see for example ref. 23).

Quantum analysis of the free particle system. We now evaluate the mean value of x and p in the state $\Psi(x, t)$. To do this, we put $I_0 = a_0 B_0$ for convenience. By executing a minor mathematical procedure using the relation $\int_0^t [2\hbar m A^2(t')]^{-1} dt' = t/[2\hbar m A_0 A(t)]$, we find that

$$\langle x \rangle = \langle \Psi(t) | x | \Psi(t) \rangle = a_0 - \frac{C_0}{mA_0} t = a_0 + \frac{\langle p \rangle}{m} t, \tag{15}$$

which is nothing but the classical position $x_c(t)$. By a similar method, we also have

$$\langle p \rangle = \langle \Psi(t) | p | \Psi(t) \rangle = -\frac{C_0}{A_0}, \tag{16}$$

which is a classical momentum $p_c(t)$. The quantum mechanical expectation values for position and momentum, determined with the Gaussian wave function, satisfy the classical equations of motion for a free particle.

Further, we can derive the position uncertainty from $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. A basic evaluation for this results in

$$\Delta x = \hbar \frac{A(t)}{\sqrt{a}} \sqrt{a^2 + \left(\int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt' \right)^2}. \tag{17}$$

Meanwhile, the momentum uncertainty yields

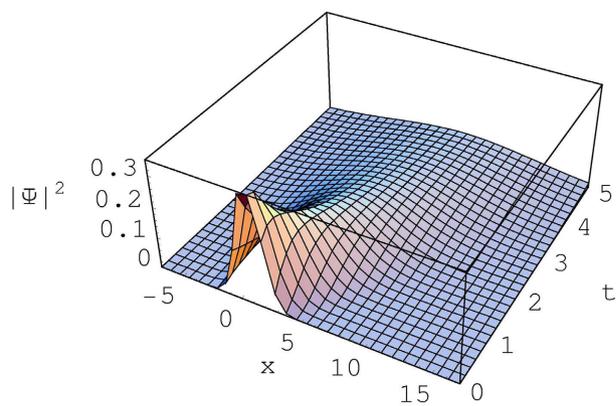
$$\begin{aligned} \Delta p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\ &= \frac{1}{\Delta x} \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{t}{4a m A_0 A(t)} - \frac{B_0}{A(t)} (\Delta x)^2 \right)^2}. \end{aligned} \tag{18}$$

The multiplication of Eq. (17) with Eq. (18) leads to the uncertainty relation:

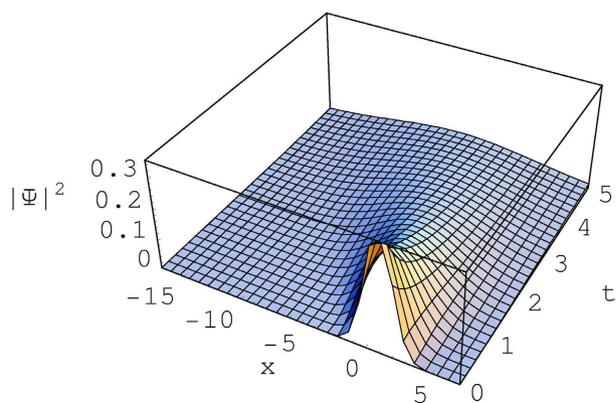
$$\Delta p \Delta x = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4} + \left(\frac{t}{4a m A_0 A(t)} - \frac{B_0}{A(t)} (\Delta x)^2 \right)^2} \geq \frac{\hbar}{2}, \tag{19}$$

which is always larger than $\hbar/2$ that is the minimally acceptable uncertainty in quantum mechanics. From Fig. 1, we see that Δx increases with time while Δp almost does not vary. Hence, the corresponding uncertainty relation increases with time. Such an increasing property of the uncertainty relation for the free particle coincides with the analysis of the uncertainty relation associated with the wave packet developed in ref. 24 (see Eq. (2.20) in that reference). This consequence has been originated from the spreading of the wave packet and is interesting if we think that the uncertainty relation for the simple harmonic oscillator does not vary with time and is always kept $\hbar/2$ in the coherent state.

Now we can rewrite Eq. (14) in terms of $\langle x \rangle$ and $\langle p \rangle$ as



(a)



(b)

Figure 2. Time evolution of the wave packet, $|\Psi(x, t)|^2$. We have used $a = 1, A_0 = 1, B_0 = -1, m = 1, \hbar = 1$, and $a_0 = 1$. The value of C_0 is -1 for (a) and 1 for (b).

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \mathcal{N}_\Psi(t) \exp\left[-\frac{i}{2\hbar} \left(\frac{I_0 C_0}{A_0 B_0} + \langle p \rangle \langle x \rangle\right)\right] \exp\left[\frac{i}{\hbar} \langle p \rangle x\right] \\ & \times \exp\left\{-\left[\frac{i}{\hbar} \frac{B_0}{2A(t)} + \frac{1}{4a(\Delta x)^2} \left(a - i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt'\right)\right] [x - \langle x \rangle]^2\right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

where $\mathcal{N}_\Psi(t) = \sqrt{\hbar A(t) \left(a - i \int_0^t \frac{1}{2\hbar m A^2(t')} dt'\right) (\sqrt{2\pi a} (\Delta x)^2)^{-1}}$. Moreover, the time-dependent probability density associated with this wave packet is Gaussian for all times and is given by

$$|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \Delta x} \exp\left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2(\Delta x)^2}\right]. \quad (21)$$

We see from this equation that the width of the wave packet at any time t is identical to Δx . This wave packet is illustrated in Fig. 2. Figure 2(a) corresponds to the wave packet for a particle moving along the positive x direction, while 2(b) for a particle moving along the negative x direction. The curve is peaked at $\langle x \rangle$ and has a sharp-fall on either side. It is also readily verified that the time-dependent probability density is conserved: $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$.

From Eq. (21), we can confirm that the wave described by Eq. (20) is a Gaussian wave packet centered at $x_c(t) = \langle x \rangle$. The width $\Delta x(t)$ of this Gaussian wave varies with time. So, during time t , the center of the packet travels from $x_c = 0$ to $x_c(t) = a_0 + \frac{\langle p \rangle}{m}t$ while its width expands from $\Delta x(0) \equiv \Delta x_0 = \hbar A_0 \sqrt{a}$ to $\Delta x(t) = \Delta x_0 \frac{A(t)}{A_0} \sqrt{1 + \left(\int_0^t \frac{1}{2\hbar m a A^2(t')} dt' \right)^2}$. Although the shape of the wave packet is always kept to be Gaussian, the packet undergoes a distortion through its spreading. As a consequence, the width of the packet gradually becomes broader over time whereas its height, $1/[\sqrt{2\pi} \Delta x(t)]$, decreases.

For further analysis of the packet, let us define a displacement unitary operator $D(\alpha, t)$ as

$$D(\alpha, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\langle p \rangle x - \langle x \rangle p)\right\}. \quad (22)$$

It is interesting that the displaced Gaussian wave function $\Psi(x, t)$ given in Eq. (20) can be regarded as a refined version of the standard coherent state obtainable by applying the displacement operator, $D(\alpha, t)$, to the ground state $\Psi_0(x, t)$, i.e.,

$$\Psi(x, t) = D(\alpha, t)\Psi_0(x, t), \quad (23)$$

where $\Psi_0(x, t)$ corresponds to a particle at rest $\langle p \rangle = 0$ at the origin $\langle x \rangle = 0$:

$$\Psi_0(x, t) = \Psi(x, t) \Big|_{\langle x \rangle=0, \langle p \rangle=0}. \quad (24)$$

It is easy to notice that, $\Psi_0(x, t)$ is obtained by replacing $\langle x \rangle$ and $\langle p \rangle$ with $\langle x \rangle = 0$, and $\langle p \rangle = 0$ in the wave function given in Eq. (20).

If we think the fact that the mean values of the canonical variables correspond to their classical counterpart ones in coherent state, i.e., $\langle x \rangle = x_c$ and $\langle p \rangle = p_c$, the action of $D(\alpha, t)$ on a wave function in the x -representation, gives $D(\alpha, t)\phi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}x_c p_c} e^{\frac{i}{\hbar}p_c x} \phi(x - x_c)$. In addition, the coordinate and momentum operators can be changed by the displacement operator to be

$$D^\dagger(\alpha, t)x D(\alpha, t) = x + x_c, \quad D^\dagger(\alpha, t)p D(\alpha, t) = p + p_c, \quad (25)$$

as expected. Indeed, the coherent state developed here plays an exquisite role for connecting quantum descriptions of the free particle with the counterpart classical descriptions.

Discussion

In this work, we have reconsidered the linear invariant proposed by Bagrov *et al.*¹³ in order to derive quantum solution of the motion of the free particle. We have shown that, if we take this linear invariant operator to be an Hermitian one, then a coherent state solution can be naturally derived based on the Lewis-Riesenfeld approach²¹.

We see from Eq. (23) that $D(\alpha, t)$ given in Eq. (22) transforms a wave function $\Psi_0(x, t)$ corresponding to a particle at rest, $\langle p \rangle = 0$, at the origin, $\langle x \rangle = 0$, into a wave function Eq. (20) associated with the particle passing a position $\langle x \rangle$ with a momentum $\langle p \rangle$. We therefore see that the Gaussian state $\Psi(x, t)$ [Eq. (20)] is created from the ground state $\Psi_0(x, t)$ by a unitary operator $D(\alpha, t)$. This state, constructed in the Glauber manner by acting the displacement operator on the vacuum state $\Psi_0(x, t)$ (defined by $\langle p \rangle = 0$ and $\langle x \rangle = 0$), is the coherent state of a free particle. The quantum expectation values for position and momentum, determined in the coherent state, satisfy the classical equations of motion for a free particle. Furthermore, as we have already seen, the coherent state remains a coherent one during its evolution with time. That is why the coherent states are used to study the classical limit of quantum mechanics. This coherent state has a “center of mass” moving along the trajectory of the corresponding classical particle. The trajectory is determined by the classical initial position and initial momentum. From these analyses, we can confirm that there is a complete quantum-classical correspondence for the free particle.

References

- Schrödinger, E. Übergang von der Mikro- zur Makromechanik. *Naturwissenschaften* **14**, 664–666 (1926).
- Glauber, R. J. The Quantum theory of optical coherence. *Phys. Rev.* **130**, 2529–2539 (1963).
- Glauber, R. J. Coherent and incoherent states of the radiation field. *Phys. Rev.* **131**, 2766–2788 (1963).
- Carruthers, P. & Nieto, M. M. Phase and angle variables in quantum mechanics. *Rev. Mod. Phys.* **40**, 411–440 (1968).
- Nieto, M. M. & Simmons, Jr. L. M. Coherent states for general potentials. *Phys. Rev. Lett.* **41**, 207–210 (1968).
- Nieto, M. M. & Simmons, Jr. L. M. Eigenstates, coherent states, and uncertainty products for the Morse oscillator. *Phys. Rev. A* **19**, 438–444 (1979).
- Nieto, M. M. & Simmons, Jr. L. M. Coherent states for general potentials. III. nonconfining one-dimensional examples. *Phys. Rev. D* **20**, 1342–1350 (1979).
- Nieto, M. M. & Simmons, Jr. L. M. Coherent states for general potentials. IV. Three-dimensional systems. *Phys. Rev. D* **22**, 391–402 (1980).
- Hartley, J. G. & Ray, J. R. Coherent states for the time-dependent harmonic oscillator. *Phys. Rev. D* **25**, 382–386 (1982).
- Ray, J. R. Minimum-uncertainty coherent states for certain time-dependent systems. *Phys. Rev. D* **25**, 3417–3419 (1982).
- Pedrosa, I. A. Comment on “Coherent states for the time-dependent harmonic oscillator”. *Phys. Rev. D* **36**, 1279–1280 (1987).
- Penna, V. Compact versus noncompact quantum dynamics of time-dependent $su(1,1)$ -valued Hamiltonians. *Ann. Phys.* **245**, 389–407 (1996).
- Bagrov, V. G., Gitman, D. M. & Pereira, A. S. Coherent and semiclassical states of a free particle. *Phys.-Usp.* **57**, 891–896 (2014).
- de la Torre, A. C. & Goyeneche, D. M. Coherent states for free particles. arXiv:1004.2620 (2010).
- Guerrero, J., Lopez-Ruiz, F. E., Aldaya, V. & Cossio, F. Harmonic states for the free particle. *J. Phys. A: Math. Theor.* **44**, 445307 (2011).

16. Geloun, J. B., Hnybida, J. & Klauder, J. R. Coherent states for continuous spectrum operators with non-normalizable fiducial states. *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 085301 (2012).
17. Dodonov, V. V. & Man'ko, V. I. Coherent states and the resonance of a quantum damped oscillator. *Phys. Rev. A* **20**, 550–560 (1979).
18. Bagrov, V. G., Gitman, D. M., Macedo, E. S. & Pereira, A. S. Coherent states of inverse oscillators and related problems. *J. Phys. A: Math. Theor.* **46**, 325305 (2013).
19. Bagrov, V. G., Gitman, D. M. & Pereira, A. S. Coherent states of systems with quadratic Hamiltonians. *Braz. J. Phys.* **45**, 369–375 (2015).
20. Bagrov, V.G., Gazeau, J.-P., Gitman, D. & Levine, A. Coherent states and related quantizations for unbounded motions. *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 125306 (2012).
21. Lewis, H. R. & Riesenfeld, W. B. An exact quantum theory of the time-dependent harmonic oscillator and of a charged particle in a time-dependent electromagnetic field. *J. Math. Phys.* **10**, 1458–1473 (1969).
22. de Lima, A. L., Rosas, A. & Pedrosa, I. A. On the quantum motion of a generalized time-dependent forced harmonic oscillator. *Ann. Phys.* **323**, 2253–2264 (2008).
23. Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. & Lalo, F. *Quantum Mechanics* Vol. 1 (New York, Wiley-VCH, 1977).
24. Littlejohn, R. G. The semiclassical evolution of wave packets. *Phys. Rep.* **138**, 193–291 (1986).

Acknowledgements

This research was supported by the Basic Science Research Program of the year 2015 through the National Research Foundation of Korea (NRF) funded by the Ministry of Education (Grant No.: 2013R1A1A2062907).

Author Contributions

The study was conceived and schemed by M.M. Mathematical evaluations in the text were performed by M.M., A.K. and H.L. The paper was written by M.M., A.K., H.L. and J.R.C. The final correction of the paper was done by J.R.C. The figures were plotted by J.R.C.

Additional Information

Competing financial interests: The authors declare no competing financial interests.

How to cite this article: Maamache, M. *et al.* Analyzing generalized coherent states for a free particle. *Sci. Rep.* **6**, 30538; doi: 10.1038/srep30538 (2016).



This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons license, unless indicated otherwise in the credit line; if the material is not included under the Creative Commons license, users will need to obtain permission from the license holder to reproduce the material. To view a copy of this license, visit <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

© The Author(s) 2016

الحالة الموافقة للحركة الكلاسيكية للجسيم الحر

الملخص

للجسيمات الحرة في ميكانيك الكم أهمية بالغة لفهم و دراسة المادة، من خلال هذا العمل نبرهن أن الحصول على حلول من اجل نظام كمومي غير خاضع لقوة يتم بحيث تكون دوال الحالة الناتجة عبارة عن دالة موجة غوس الموافقة للحركة الكلاسيكية.

من أجل حل معادلة شرودينغير المرفقة بجسيمة حرة نستعمل اللامتغير الخطي للويس وريزنفيلد. تبين لنا في هذا العمل أن الحل العام لمعادلة شرودينغير يمكن ان تستمد بشكل طبيعي باستخدام طريقة أبسط بحيث يتم وصفها باستعمال اللامتغير الخطي الهرميتاني وذلك بخلاف الدراسة التي قام بها باغروف و آخرون. بالنسبة للجسيمات الحرة، حيث يتم وصفها باستخدام اللامتغير الخطي غير الهرميتي وهي الدراسة التي تتطلب العديد من التقريبات الرياضية للوصول الى النتيجة المطلوبة

الكلمات المفتاحية: الجسيم الحر، موجة غوس، الحركة الكلاسيكية، معادلة شورديينغير،

اللامتغير الخطي الهرميتي، اللامتغير الخطي الغير الهرميتي

Analyzing coherent states for a free particle

Abstract :

The didactic importance of a free particle in quantum mechanics, its analysis of the coherent state, has long been intact. It was only recently that he was noticed and studied in the semi-classical field. Although the known solutions, reported by Bagrov et al. For a free particle are described using the non Hermitian linear invariant operator, we show in this work that the general solution of the Schrödinger equation can also be naturally computed using a simpler method based on a hermitian linear invariant operator. According to this, an exact Gaussian wave function that corresponds to a coherent state is the solution Obtained.

Key words: free particle, coherent state, semi-classical, linear invariant operator, Gaussian, wave function, Schrödinger equation

Résumé :

Dans cette thèse nous avons défini les états cohérents de la particule libre. Notre démarche s'appuie sur les invariants linéaires Hermitiques contrairement à la méthode utilisée par **Bagrov et al** qui utilisent un invariant dépendant du temps non Hermitique linéaire en p et x . L'invariant utilisé par **Bagrov et al** ne vérifie ces trois propriétés, De plus ils imposent trop de contraintes pour obtenir les états cohérents de la particule libre. Notre travail est critique vis à vis de celui de **Bagrov et al** dans la mesure où les solutions de l'équation de Schrödinger obtenues sur la combinaison des fonctions propres d'un invariant linéaire hermitique ont une forme Gaussienne et évoluent au cours du temps tout en restant Gaussien. Ces paquets d'onde Gaussiens vérifient toutes les propriétés relatives aux états cohérents.

Les mots clés : les états cohérents, particule libre, les invariants linéaires Hermitiques, les invariants linéaires non Hermitiques, paquet d'onde Gaussienne