

Université de Montréal

**Optimisation et approximation adiabatique**

par  
Louis Renaud-Desjardins

Département de Physique  
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de Maître ès sciences (M.Sc.)  
en Physique

Décembre, 2010

© Louis Renaud-Desjardins, 2010.

Université de Montréal  
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé:

**Optimisation et approximation adiabatique**

présenté par:

Louis Renaud-Desjardins

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes:

Manu Paranjape,	président-rapporteur
Richard MacKenzie,	directeur de recherche
Viktor Zacek,	membre du jury

Mémoire accepté le: .....

## RÉSUMÉ

L'approximation adiabatique en mécanique quantique stipule que si un système quantique évolue assez lentement, alors il demeurera dans le même état propre. Récemment, une faille dans l'application de l'approximation adiabatique a été découverte. Les limites du théorème seront expliquées lors de sa dérivation.

Ce mémoire a pour but d'optimiser la probabilité de se maintenir dans le même état propre connaissant le système initial, final et le temps d'évolution total. Cette contrainte sur le temps empêche le système d'être assez lent pour être adiabatique.

Pour solutionner ce problème, une méthode variationnelle est utilisée. Cette méthode suppose connaître l'évolution optimale et y ajoute une petite variation. Par après, nous insérons cette variation dans l'équation de la probabilité d'être adiabatique et développons en série. Puisque la série est développée autour d'un optimum, le terme d'ordre un doit nécessairement être nul. Ceci devrait nous donner un critère sur l'évolution la plus adiabatique possible et permettre de la déterminer.

Les systèmes quantiques dépendants du temps sont très complexes. Ainsi, nous commencerons par les systèmes ayant des énergies propres indépendantes du temps. Puis, les systèmes sans contrainte et avec des fonctions d'onde initiale et finale libres seront étudiés.

**Mots clés: mécanique quantique, théorème adiabatique, calcul variationnel, informatique quantique.**

## ABSTRACT

The adiabatic approximation in quantum mechanics states that if the Hamiltonian of a physical system evolves slowly enough, then it will remain in the instantaneous eigenstate related to the initial eigenstate. Recently, two researchers found an inconsistency in the application of the approximation. A discussion about the limit of this idea will be presented. Our goal is to optimize the probability to be in the instantaneous eigenstate related to the initial eigenstate knowing the initial and final system, with the total time of the experiment fixed to  $T$ . This last condition prevents us from being slow enough to use the adiabatic approximation.

To solve this problem, we turn to the calculus of variation. We suppose the ideal evolution is known and we add a small variation to it. We take the result, put it in the probability to be adiabatic and expand in powers of the variation. The first order term must be zero. This enables us to derive a criterion which will give us conditions on the ideal Hamiltonian. Those conditions should define the ideal Hamiltonian.

Time dependent quantum systems are very complicated. To simplify the problem, we will start by considering systems with time independent energies. Afterward, the general case will be treated.

**Keywords:** quantum mechanics, adiabatic theorem, calculus of variation, quantum computing

## TABLE DES MATIÈRES

<b>RÉSUMÉ</b> . . . . .	<b>iii</b>
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	<b>iv</b>
<b>TABLE DES MATIÈRES</b> . . . . .	<b>v</b>
<b>LISTE DES FIGURES</b> . . . . .	<b>vii</b>
<b>LISTE DES ANNEXES</b> . . . . .	<b>viii</b>
<b>DÉDICACE</b> . . . . .	<b>ix</b>
<b>REMERCIEMENTS</b> . . . . .	<b>x</b>
<b>CHAPITRE 1 : INTRODUCTION</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>CHAPITRE 2 : INTRODUCTION À LA MÉCANIQUE QUANTIQUE ET APPROXIMATION ADIABATIQUE</b> . . . . .	<b>3</b>
2.1 Introduction à la mécanique quantique . . . . .	3
2.2 Théorème adiabatique . . . . .	6
2.3 Approximation adiabatique . . . . .	8
2.3.1 Dérivation de l'approximation . . . . .	8
2.3.2 Critère . . . . .	10
2.3.3 Inconsistance du critère d'adiabaticité . . . . .	13
2.4 Applications de l'approximation adiabatique . . . . .	17
2.4.1 Approximation de Born-Oppenheimer . . . . .	17
2.4.2 Inversion de population de spins . . . . .	19
2.4.3 Informatique quantique adiabatique . . . . .	20

<b>CHAPITRE 3 :</b>	<b>OPTIMISATION DU RÉSULTAT DE L'APPROXIMATION</b>	
	<b>ADIABATIQUE POUR UN CAS PARTICULIER . . . . .</b>	<b>22</b>
3.1	Mise en contexte . . . . .	22
3.2	Calcul variationnel . . . . .	23
3.3	Vérification . . . . .	27
<b>CHAPITRE 4 :</b>	<b>GÉNÉRALISATION . . . . .</b>	<b>30</b>
4.1	Calcul variationnel . . . . .	30
4.2	Exemple . . . . .	33
4.3	Vérification . . . . .	37
<b>CHAPITRE 5 :</b>	<b>CONCLUSION . . . . .</b>	<b>38</b>
<b>BIBLIOGRAPHIE . . . . .</b>		<b>. xviii</b>

## LISTE DES FIGURES

2.1	Énergies instantanées d'un système quantique. . . . .	8
2.2	Effet d'une grande fréquence sur une fonction. Le graphique présente une fonction variant lentement, une oscillation rapide par rapport à cette fonction et leur produit. Les parties foncées et pâles représentent l'intégrale de la troisième fonction. Les parties foncées sont presque identiques à leur parties pâles voisines. L'intégrale sera donc très petite. . . . .	11
2.3	Champ magnétique tournant autour d'un axe. . . . .	13
2.4	Champ magnétique tournant autour d'un axe dans le référentiel tournant avec le champ. . . . .	14
2.5	Illustration géométrique des différentes fréquences à l'aide de la loi des cosinus. . . . .	16
2.6	Allure du potentiel entre deux noyaux. Le noyau oscillera autour du minimum du potentiel. Si les noyaux sont très éloignés, l'énergie potentielle entre eux devient nulle et ils sont libres. . . . .	19

## LISTE DES ANNEXES

<b>Annexe I :</b>	<b>Preuve du théorème adiabatique . . . . .</b>	<b>xi</b>
<b>Annexe II :</b>	<b>Preuve d'une identité des matrices <math>\sigma</math> . . . . .</b>	<b>xvi</b>



À tout ce qui ose être lent.

## REMERCIEMENTS

J'aimerais remercier avant tout l'infinie patience de mon directeur de recherche Richard MacKenzie. Il a investi énormément de temps à répondre à mes questions. Sans lui, ce mémoire n'aurait pas vu le jour.

Merci à tous mes copains de bureau pour leur humour et leur aide.

Merci à tous mes amis et toute ma famille pour leur soutien.

Je remercie particulièrement ceux qui ont osé lire mon mémoire et m'ont aidé à le corriger pour l'améliorer.

Un gros merci à Johanne Borduas et Louis Lemay pour leur appui administratif. Vous faites un travail incroyable qui a facilité grandement tous mes rapports avec l'administration.

Finalement, merci à mes investisseurs : le CRSNG, ma maman et les fonds de recherche de Richard MacKenzie.

# CHAPITRE 1

## INTRODUCTION

La mécanique quantique a réussi à décrire la nature corpusculaire et ondulatoire de la matière. Son formalisme est très complexe et souvent il est impossible de trouver une solution analytique à la dynamique des particules. Si la situation est indépendante du temps, il y a une solution formelle. Par contre, lorsque le système quantique dépend du temps, il n'y a que quelques cas qui peuvent être solutionnés analytiquement. Pour résoudre de tels systèmes, il faut utiliser des approximations telle que l'approximation adiabatique. Elle s'applique aux systèmes évoluant lentement dans le temps. Cette approximation s'est inspirée du théorème adiabatique énoncé en 1928 par Born et Fock dans les débuts de la mécanique quantique.

Quand est qu'un système est assez lent pour pouvoir utiliser l'approximation adiabatique ? Un critère de lenteur a été trouvé et est devenu le critère usuel pour l'approximation adiabatique. Récemment, une inconsistance a été découverte dans son application. Depuis, plusieurs chercheurs ont cherché à comprendre d'où venait cette faille pendant que d'autres cherchaient à y remédier en trouvant un nouveau critère qui n'aurait pas de faille.

Face aux limites de cette approximation, plusieurs avenues sont ouvertes pour améliorer les idées de l'approximation adiabatique. Une d'elles est de maximiser son résultat pour un certain type de situation. Connaissant les conditions finales et initiales d'un système quantique, quelle évolution maximise le résultat de l'approximation ? Ce mémoire tente de répondre à cette interrogation et est à notre connaissance innovateur.

Voici une analogie classique de ce que ce mémoire veut accomplir. Soit un verre d'eau plein qui doit être déplacé d'un endroit vers un autre. Quel déplacement permet de

garder le plus d'eau dans le verre ? Un déplacement extrêmement lent aurait de petites perturbations sur l'eau et aucune goutte d'eau ne serait perdue. Ceci est équivalent à l'approximation adiabatique en mécanique quantique. Maintenant, le déplacement doit se faire en un temps total fixe. Il n'est plus possible d'aller très lentement. Il faudra donc incliner le verre aux bons moments pour conserver un maximum d'eau.

Avant de tenter d'optimiser l'approximation adiabatique, il faut comprendre la mécanique quantique. Ainsi, une introduction à la mécanique quantique ainsi qu'à l'approximation adiabatique et ses limites sera présentée au chapitre 2. L'approximation adiabatique est intéressante par son application plus que par ses implications théoriques. Trois champs d'étude qui utilisent l'approximation adiabatique seront donc détaillés.

Par après, il sera possible d'énoncer mathématiquement la question. Le calcul variationnel sera utilisé pour y répondre. Cette méthode suppose connaître l'évolution idéale et y ajoute une petite variation. Ensuite, les propriétés des séries et des optimums permettent de tirer un critère sur l'évolution idéale. Pour simplifier la tâche, seuls les systèmes avec des valeurs propres constantes dans le temps seront considérés.

En dernier lieu, des systèmes plus généraux seront traités.

## CHAPITRE 2

### INTRODUCTION À LA MÉCANIQUE QUANTIQUE ET APPROXIMATION ADIABATIQUE

En guise d'introduction, un bref rappel de la mécanique quantique sera présenté suivi des formulations du théorème adiabatique et de l'approximation adiabatique. Par après, trois applications de l'approximation adiabatique seront détaillées : l'approximation de Born-Oppenheimer, l'inversion de population de spin et l'informatique quantique adiabatique.

#### 2.1 Introduction à la mécanique quantique

La mécanique quantique tente d'élucider le comportement des particules et des atomes. Elle réussit à expliquer les propriétés corpusculaires et ondulatoires de la matière. La dynamique d'un tel système est régie par l'équation de Schrödinger

$$i\dot{|\Psi(t)\rangle} = H(t)|\Psi(t)\rangle^{1,2} \quad (2.1)$$

où  $H(t)$  est le Hamiltonien. Il représente l'énergie du système au temps  $t$ . Dans ce mémoire, le Hamiltonien a la forme d'une matrice hermitienne finie. Il existe en mécanique quantique des systèmes discrets infinis et des systèmes continus qui ne seront pas considérés ici.

Si le Hamiltonien est indépendant du temps, (2.1) a une solution formelle

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle.^3 \quad (2.2)$$

---

<sup>1</sup> $\dot{\beta}(t) = \frac{d}{dt}\beta(t)$

<sup>2</sup>Partout dans ce mémoire, les unités sont choisies tel que  $\hbar = 1$ .

<sup>3</sup>L'exponentielle d'une matrice est définie par sa série de Taylor.

Le Hamiltonien possède des états propres  $|n\rangle$  et des énergies propres  $E_n$  donnés par

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle. \quad (2.3)$$

Puisque  $H$  est une matrice hermitienne finie, il est toujours possible de trouver les  $E_n$  et les  $|n\rangle$ . Nous pouvons réécrire la solution générale de la manière suivante

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t} |n\rangle. \quad (2.4)$$

Si le Hamiltonien est indépendant du temps, il suffit de solutionner (2.3) pour déterminer la solution du système. De (2.4), il découle que si le système débute dans un état propre, il demeurera dans celui-ci.

Si le Hamiltonien a une dépendance temporelle, il est généralement impossible de résoudre l'équation de Schrödinger. Il est nécessaire d'utiliser d'approximations telle que l'approximation adiabatique pour résoudre (2.1). Puisque le système évolue dans le temps, les états et énergies propres doivent être défini pour chaque valeur de  $t$

$$H(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle. \quad (2.5)$$

Résoudre cette équation équivaut à trouver les états propres et énergies propres d'un Hamiltonien indépendant du temps donné par  $H(t)$ . Le temps devient ainsi un paramètre. Ces  $|n(t)\rangle$  et  $E_n(t)$  forment respectivement une base d'états propres instantanés et d'énergies propres instantanées pour  $|\Psi(t)\rangle$  qui peuvent être ajustés pour être orthonormés

$$\langle n(t)|m(t)\rangle = \delta_{n,m}. \quad (2.6)$$

Il est possible de modifier cette base pour qu'elle réponde à

$$\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle = 0. \quad (2.7)$$

Supposons une base  $|m(t)\rangle$  qui ne satisfait pas (2.7). Dans ce cas, il suffit de la redéfinir par

$$|\tilde{m}(t)\rangle = e^{\int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt'} |m(t)\rangle. \quad (2.8)$$

Ce changement de base est acceptable parce que  $\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle$  est imaginaire :

$$\frac{d}{dt} \langle m(t) | m(t) \rangle = 0 = \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle + \langle \dot{m}(t) | m(t) \rangle = 2\text{Re} \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle.$$

La nouvelle base a comme propriété

$$\begin{aligned} \langle \tilde{m}(t) | \dot{\tilde{m}}(t) \rangle &= \langle m(t) | e^{-\int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt'} e^{\int_0^t \langle m(t') | \dot{m}(t') \rangle dt'} (-\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle |m(t)\rangle + |\dot{m}(t)\rangle) \\ &= -\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle + \langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Cette nouvelle base satisfait donc (2.7).

Dernièrement, il est possible de reformuler la dynamique des systèmes quantiques à l'aide de l'opérateur d'évolution temporelle  $U(t)$

$$|\Psi(t)\rangle = U(t) |\Psi(0)\rangle \quad (2.10)$$

où  $U(t)$  est une matrice unitaire. En insérant cette définition dans l'équation de Schrödinger, nous obtenons une équation sur l'évolution de  $U(t)$

$$i\dot{U}(t) = H(t)U(t). \quad (2.11)$$

Si le Hamiltonien est indépendant du temps, nous remarquons en examinant (2.2) que

$$U(t) = e^{-iHt} \quad (2.12)$$

qui est la solution formelle pour l'opérateur d'évolution temporelle si le Hamiltonien ne dépend pas du temps. Si le Hamiltonien dépend du temps, il est aussi possible de trouver une solution formelle. Il faut intégrer (2.11)

$$\begin{aligned} U(t) &= \mathbb{1} - i \int_{t_0}^t H(t_1)U(t_1)dt_1 \\ &= \mathbb{1} - i \int_{t_0}^t H(t_1)dt_1 + (-1)^2 \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2)U(t_2)dt_1dt_2 \\ &= \mathbb{1} - i \int_{t_0}^t H(t_1)dt_1 + \dots + (-i)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2) \dots H(t_n)dt_1dt_2 \dots dt_n + \dots \\ &= \hat{T} e^{-i \int_{t_0}^t H(t_1)dt_1} . \end{aligned} \quad (2.13)$$

où  $\hat{T}$  est l'opérateur d'ordre chronologique. La seconde ligne s'obtient en insérant la première ligne en elle-même. La troisième ligne est le résultat d'insérer la première ligne une infinité de fois en elle-même. La dernière ligne est une manière très compacte d'écrire tous les termes de la troisième ligne.

## 2.2 Théorème adiabatique

Le théorème adiabatique a été énoncé en 1928 par Born et Fock [1] dans les débuts de la mécanique quantique. Soit un système composé d'un Hamiltonien initial qui évolue vers un Hamiltonien final en un temps  $T$  :

$$i|\dot{\Psi}(t)\rangle = H(t/T)|\Psi(t)\rangle \quad (2.14)$$



où  $t \in [0, T]$ ,  $H(0) = H_i$  et  $H(1) = H_f$ . Faisons le changement de variable  $s = t/T$  pour faire ressortir la dépendance sur le temps total de l'expérience. L'équation (2.14) devient

$$\frac{i}{T} |\dot{\phi}(s)\rangle = H(s) |\phi(s)\rangle \quad (2.15)$$

où  $\phi(s) = \Psi(tT)$ .

Cet Hamiltonien doit avoir un état propre instantané  $|\Phi(s)\rangle$  avec une énergie propre  $E(s)$  non-dégénérée. Le système débute dans cet état propre. Une version récente du théorème stipule que l'équation de Schrödinger a une solution de la forme

$$e^{iT \int_0^s ds' E(s')} (|\Phi(s)\rangle + O(T^{-1})) \quad (2.16)$$

La preuve du théorème se trouve en annexe.

Voici une formulation plus intuitive du théorème adiabatique. Soit un système décrit par un Hamiltonien dépendant du temps  $H(t)$ . Le théorème adiabatique stipule que si nous commençons dans un état propre de  $H(0)$ ,  $|m(0)\rangle$ , et que l'évolution temporelle de notre système est infiniment lente et sans dégénérescence, alors le système demeurera dans l'état propre instantané relié à l'état propre initial.

Si un système débute dans l'état  $|0(t=0)\rangle$ , la ligne épaisse de la figure 2.1, et que l'évolution est adiabatique, alors il suivra cette courbe d'énergie.

La flamme pour la recherche sur ce théorème a été rallumée par Marzlin et Sanders [2] en 2004. Ils ont observé une inconsistance lors de l'application du théorème. Depuis, plusieurs chercheurs se sont penchés sur ce problème [3–9].

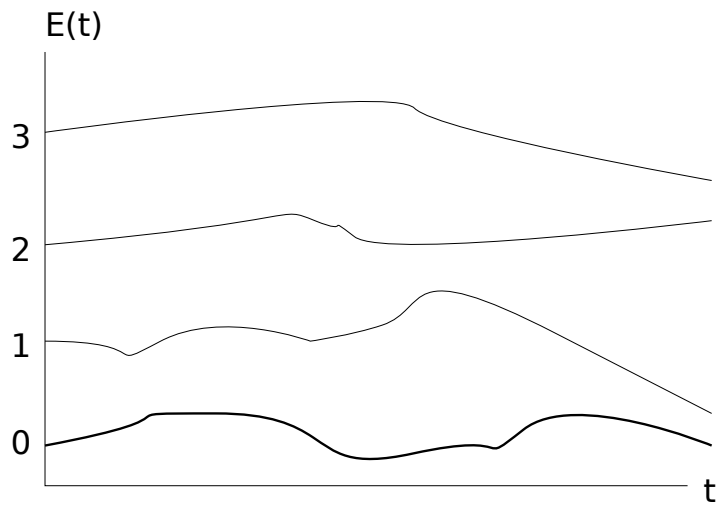


Figure 2.1 – Énergies instantanées d'un système quantique.

### 2.3 Approximation adiabatique

Intuitivement, un système évoluant très lentement ressemblera à un système infiniment lent. Ainsi, le théorème adiabatique devrait s'appliquer avec quelques corrections pour une telle situation

$$|\Psi_{adi}(t)\rangle \approx |l(t)\rangle \quad (2.17)$$

où le système a débuté dans l'état  $|l(0)\rangle$ .

Premièrement, l'approximation adiabatique sera dérivée. Par après, le régime dans lequel il est possible de l'utiliser sera défini. Finalement, une faille dans l'application du critère sera expliquée.

#### 2.3.1 Dérivation de l'approximation

Débutons avec un Hamiltonien dépendant du temps,  $H(t)$ , et une particule dans un état propre de  $H(0)$ ,  $|l(0)\rangle$ . Nous pouvons écrire cet état en terme des états propres

instantanés de  $H(t)$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{i\theta_n(t)} |n(t)\rangle \quad (2.18)$$

où  $\theta_n(t) = -\int_0^t dt' E_n(t')$  et où les coefficients  $c_n(t)$  sont à déterminer. Si nous introduisons (2.18) dans (2.1), nous obtenons

$$\begin{aligned} \sum_n c_n(t) H(t) |n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)} &= \sum_n c_n(t) E_n(t) |n(t)\rangle e^{i\theta_n(t)} \\ &= i \sum_n \left( ic_n(t) |n(t)\rangle \dot{\theta}_n(t) + c_n(t) |\dot{n}(t)\rangle + \dot{c}_n(t) |n(t)\rangle \right) e^{i\theta_n(t)} \\ &= \sum_n \left( c_n(t) |n(t)\rangle E_n(t) + ic_n(t) |\dot{n}(t)\rangle + i\dot{c}_n(t) |n(t)\rangle \right) e^{i\theta_n(t)} \end{aligned} \quad (2.19)$$

Les termes identiques s'annulent et nous prenons le produit scalaire entre (2.19) et  $\langle m(t) | e^{i\theta_m(t)}$  pour obtenir

$$\dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}. \quad (2.20)$$

Ces équations sont une reformulation de l'équation de Schrödinger.

Si

$$\dot{c}_m(t) = 0, \quad (2.21)$$

alors

$$c_m(t) = c_m(0). \quad (2.22)$$

Ainsi, la probabilité d'être dans un état ne change pas, tout comme dans le théorème adiabatique. Puisque nous avons débuté dans l'état  $|l(0)\rangle$  alors  $c_n(0) = \delta_{n,l}$  et le vecteur d'onde totale est

$$|\Psi_{adi}(t)\rangle = e^{i\theta_l(t)} |l(t)\rangle. \quad (2.23)$$

Négliger  $\sum_n c_n(t) \langle m(t) | \dot{n}(t) \rangle e^{i(\theta_n(t) - \theta_m(t))}$  dans (2.20) est l'approximation adiabatique.

### 2.3.2 Critère

La lenteur d'un système peut être comprise de deux façons. La première exige que tous les états varient lentement. De cette manière, le système est adiabatique. La seconde option réclame que seul l'état initial varie lentement. Encore une fois, l'évolution du système sera adiabatique mais avec une condition réduite. Cette condition réduite est celle qui sera dérivée dans cette section. Ainsi, notre intérêt se porte uniquement sur l'état  $|l(t)\rangle$  qui est l'état initial.

Intégrons (2.20) pour  $m = l$

$$c_l(t) - c_l(0) = \int_0^t dt' \sum_{n \neq l} c_n(t') \langle l(t') | \dot{n}(t') \rangle e^{i(\theta_n(t') - \theta_l(t'))}. \quad (2.24)$$

L'équation (2.24) a la forme suivante

$$\int_0^t dt' f(t') e^{i\omega(t')t'}. \quad (2.25)$$

Si lors d'un cycle de l'exponentielle  $f(t')$  varie peu, alors l'intégrale sur ce cycle sera petite tel qu'illustré sur la figure 2.2. En s'assurant que la plus grande valeur de (2.24) soit négligeable, nous nous assurons d'être adiabatique. La valeur maximale de (2.24) s'obtient lorsque la fréquence est à son minimum et  $c_n(t) = 1$

$$\int_0^t dt' \sum_{n \neq l} \langle l(t') | \dot{n}(t') \rangle e^{i \min |E_n - E_l| t'} \quad (2.26)$$

où  $\min |E_n - E_l|$  est la valeur minimale de  $|E_n - E_l|$  entre 0 et  $T$ . Nous pouvons séparer cette intégrale en plusieurs segments où le terme non exponentiel varie peu et le terme

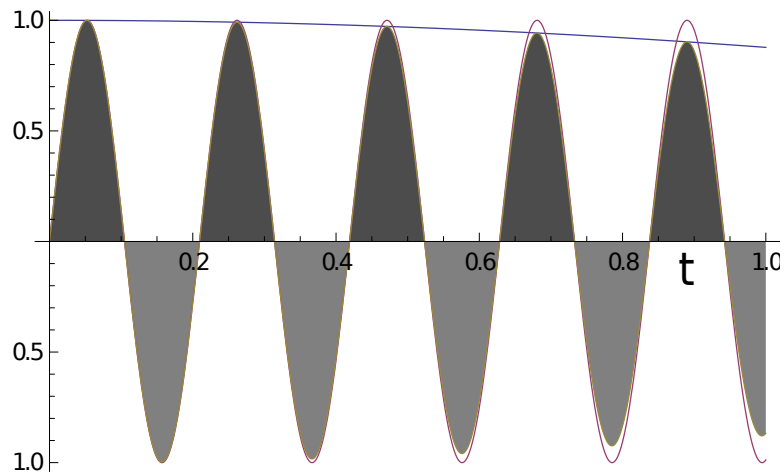


Figure 2.2 – Effet d’une grande fréquence sur une fonction. Le graphique présente une fonction variant lentement, une oscillation rapide par rapport à cette fonction et leur produit. Les parties foncées et pâles représentent l’intégrale de la troisième fonction. Les parties foncées sont presque identiques à leur parties pâles voisines. L’intégrale sera donc très petite.

exponentielle parcourt plusieurs cycles. Pour un segment, l’intégrale donnera

$$\sum_{n \neq l} \frac{\langle l(t') | \dot{n}(t') \rangle}{i \min |E_n - E_l|} e^{i \min |E_n - E_l| \Delta t'} \quad (2.27)$$

La norme de (2.27) caractérise son impact

$$\left| \sum_{n \neq l} \frac{\langle l(t') | \dot{n}(t') \rangle}{i \min |E_n - E_l|} e^{i \min |E_n - E_l| t'} \right| \leq \sum_{n \neq l} \left| \frac{\langle l(t') | \dot{n}(t') \rangle}{\min |E_n - E_l|} \right| \quad (2.28)$$

Si ce terme est négligeable alors les segments de l’intégrale le seront. Le critère est donc

$$\sum_{n \neq l} \left| \frac{\langle l(t') | \dot{n}(t') \rangle}{\min |E_n - E_l|} \right| \ll 1. \quad (2.29)$$

Cette condition est le critère de lenteur habituel pour l’approximation adiabatique. Le critère implique que les segments de l’intégrale (2.26) seront minimes mais pas leur somme. À force d’ajouter des segments, (2.24) ne pourrait plus être considéré comme négli-

geable. Ainsi, il manque au critère une limite sur la durée totale de l'expérience.

Il est important que  $E_n(t)$  soit différente de  $E_l(t)$  pour toutes les valeurs de  $n \neq l$ , sinon il est impossible d'aller suffisamment lentement pour satisfaire le critère adiabatique. Il faut ainsi éliminer les systèmes comportant des dégénérescences.

Le choix de base  $\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle$  facilite les calculs pour déterminer le critère mais ne change pas la valeur des termes le constituant. Il est ainsi possible d'utiliser une base qui ne respecte pas (2.7)

$$\begin{aligned} \sum_{n \neq l} \left| \frac{\langle \tilde{l}(t)|\dot{\tilde{n}}(t)\rangle}{\min(E_n - E_l)} \right| &= \sum_{n \neq l} \left| \frac{\langle l(t)|e^{i \int_0^t dt' \alpha(t')} e^{-i \int_0^t dt' \alpha(t')} (|\dot{n}(t)\rangle - i\alpha(t)|n(t)\rangle)}{\min(E_n - E_l)} \right| \\ &= \sum_{n \neq l} \left| \frac{\langle l(t)|\dot{n}(t)\rangle}{\min(E_n - E_l)} \right| \\ &= \sum_{n \neq l} \left| \frac{\langle l(t)|\dot{n}(t)\rangle}{\min(E_n - E_l)} \right|. \end{aligned}$$

Définissons l'adiabaticité

$$A(t) = |\langle l(t)|\Psi(t)\rangle|^2 \quad (2.30)$$

qui est la probabilité d'être adiabatique au temps  $t$ . Cette quantité sera le point focalisant de ce mémoire. Les chapitres 3 et 4 tenteront de l'optimiser dans certaines situations. Tout au long de ce mémoire lorsqu'il sera dit d'un système qu'il est adiabatique, il faudra comprendre que  $A(T) \approx 1$ . Habituellement, un système adiabatique est un système évoluant lentement dans le temps. Il est important de faire cette distinction puisqu'un système lent a toujours une adiabaticité proche de un tandis qu'un système qui n'est pas lent peut avoir une adiabaticité proche de un. La définition de système adiabatique de ce mémoire inclue aussi les cas non-lents avec une adiabaticité de un.

### 2.3.3 Inconsistance du critère d'adiabaticité

Le critère d'adiabaticité est incorrect dans certaines situations. En voici une : un champ magnétique constant en  $\hat{z}$ ,  $\mathbf{B}_z$ , avec un champ tournant dans le plan  $OXY$ ,  $\mathbf{B}_x(t)$ . Initialement, le spin d'un électron est parallèle au champ total,  $\mathbf{B}(t)$ . Les détails de l'inconsistance du critère d'adiabaticité proviennent de [3]. Le Hamiltonien est :

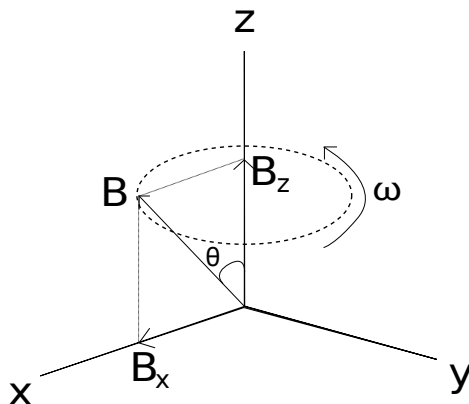


Figure 2.3 – Champ magnétique tournant autour d'un axe.

$$H(t) = -\frac{\gamma}{2} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(t) = -\frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{i\omega t} \\ \sin \theta e^{-i\omega t} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

où  $\gamma$  est le moment gyromagnétique de la particule,  $\mathbf{B} = B(\sin \theta \cos(\omega t)\hat{x} - \sin \theta \sin(\omega t)\hat{y} + \cos \theta \hat{z})$ ,  $\omega_0 = \frac{\gamma B}{2}$ ,  $\mathbf{S} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^3 \sigma_{\mu} \hat{x}_{\mu}$ ,  $\sigma_{\mu}$  sont les matrices de Pauli. Les valeurs et vecteurs propres instantanés de (2.31) sont :

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{\omega_0}{2}, & |0(t)\rangle &= \begin{pmatrix} e^{\frac{i\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-\frac{i\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ E_1 &= \frac{\omega_0}{2}, & |1(t)\rangle &= \begin{pmatrix} e^{\frac{i\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-\frac{i\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Le critère d'adiabaticité prédit que le spin restera parallèle au champ magnétique si

$$\frac{\omega \sin \theta}{\omega_0} \ll 1. \quad (2.33)$$

Cette situation a une solution analytique. Trouvons cette solution et vérifions si la condition du critère implique que le système sera adiabatique.

Résolvons ce système dans le référentiel tournant avec le champ magnétique.

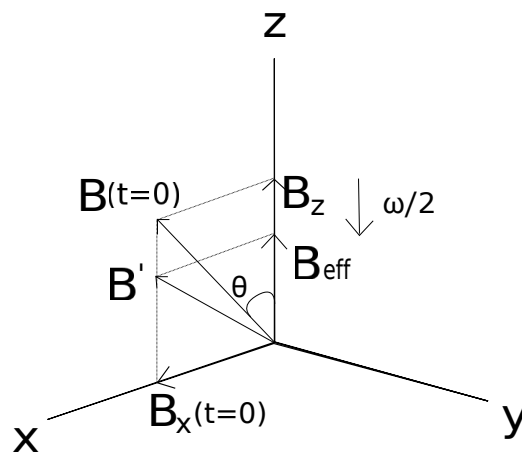


Figure 2.4 – Champ magnétique tournant autour d'un axe dans le référentiel tournant avec le champ.

$$H(t) = -\frac{\omega_0}{2} e^{i\omega t \sigma_z/2} H(0) e^{-i\omega t \sigma_z/2} \quad (2.34)$$

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\omega t \sigma_z/2} |\Psi'(t)\rangle \quad (2.35)$$

où  $H(0)$  est le Hamiltonien du champ magnétique initial. En insérant ces définitions dans



l'équation de Schrödinger et en multipliant par  $e^{-i\omega t\sigma_z/2}$ , nous obtenons

$$\begin{aligned}
i|\dot{\Psi}'(t)\rangle &= \left(-\frac{\omega_0}{2}H(0) + \frac{\omega}{2}\sigma_z\right)|\Psi'(t)\rangle \\
&= \left(-\frac{\gamma B_0 - \omega}{2}\sigma_z - \frac{\gamma B_1}{2}\sigma_x\right)|\Psi'(t)\rangle \\
&= \left(-\frac{\gamma B_{eff}}{2}\sigma_z - \frac{\gamma B_1}{2}\sigma_x\right)|\Psi'(t)\rangle \\
&= -\frac{\gamma}{2}\mathbf{B}' \cdot \boldsymbol{\sigma}|\Psi'(t)\rangle = H'|\Psi'(t)\rangle.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Dans ce référentiel, le Hamiltonien ne dépend pas du temps et il représente  $\mathbf{B}(T=0)$  avec une contribution négative en  $\hat{z}$  tel qu'illustré à la figure 2.4. Si le champ magnétique tournait à la fréquence de résonance,  $\omega = \gamma B_0$ , il n'y aurait plus de champ magnétique vertical.

Il est maintenant possible de résoudre (2.36) à l'aide de (2.12) parce que le Hamiltonien est indépendant du temps.

$$|\Psi'(t)\rangle = e^{iH't}|\Psi'(0)\rangle \tag{2.37}$$

Dans le référentiel du laboratoire, l'état du système est

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\omega t\sigma_z/2}e^{-iH't}|\Psi(0)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle \tag{2.38}$$

Pour calculer la valeur de l'exponentielle, il faut utiliser cette relation

$$e^{i\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}} = \cos a + i\hat{a} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin a.^4 \tag{2.39}$$

---

<sup>4</sup>La preuve de cette identité se trouve en annexe.

Une fois le produit matriciel fait, l'opérateur d'évolution temporelle est

$$U(t) = \begin{pmatrix} \left( \cos \frac{\bar{\omega}t}{2} + i \frac{(\omega_0 - \omega) \cos \theta}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} \right) e^{i\omega t/2} & -i \frac{\omega_0 \sin \theta}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} e^{i\omega t/2} \\ -i \frac{\omega_0 \sin \theta}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} e^{-i\omega t/2} & \left( \cos \frac{\bar{\omega}t}{2} - i \frac{(\omega_0 - \omega) \cos \theta}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} \right) e^{-i\omega t/2} \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

où  $\bar{\omega}^2 = \omega^2 + \omega_0^2 - 2\omega\omega_0 \cos \theta$ . La figure 2.5 représente le lien entre les différentes fréquences.

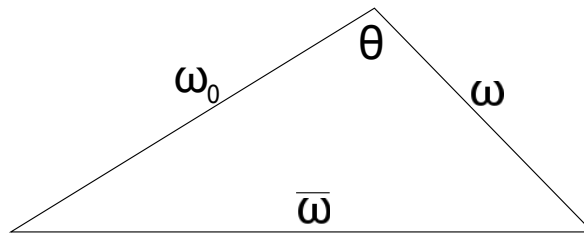


Figure 2.5 – Illustration géométrique des différentes fréquences à l'aide de la loi des cosinus.

Calculons l'adiabaticité de ce système si le spin commence aligné avec le champ magnétique

$$\begin{aligned} A(t) &= |\langle 0(t) | \Psi(t) \rangle|^2 \\ &= |\langle 0(t) | U(t) | 0(0) \rangle|^2 \\ &= 1 - \left( \frac{\omega}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} \sin \theta \right)^2. \end{aligned} \quad (2.41)$$

En se basant sur (2.41), l'adiabaticité sera proche de un si

$$\frac{\omega \sin \theta}{\bar{\omega}} \ll 1. \quad (2.42)$$

Est-ce que le critère adiabatique (2.33) assure l'inégalité (2.42) ? Non, si

$$\left| \frac{\omega_0}{\omega} \right| < 2 \cos \theta \quad (2.43)$$

alors le critère d'adiabaticité peut être respecté mais pas la condition découlant de la solution analytique. Cette situation survient quand  $\theta$  est petit et  $\omega$  est grand. Pour cette situation, le système varie rapidement mais peu. Puisque le système varie peu, le critère d'adiabaticité usuel est satisfait. Par contre, parce que le système varie rapidement, alors le spin ne réussit pas à suivre le champ magnétique et ainsi le système n'est pas adiabatique.

Cette inconsistance du critère adiabatique ainsi que sa limite sur le temps total de l'évolution ont amené plusieurs chercheurs à postuler de nouveaux critères [6, 8, 9].

## 2.4 Applications de l'approximation adiabatique

L'approximation adiabatique tire son intérêt de son application plus que de ses implications théoriques. Elle nous permet de trouver une solution sous un certain régime à des systèmes *a priori* insolubles. Voici trois situations où l'approximation adiabatique est utilisée : l'approximation de Born-Oppenheimer, l'inversion de population de spins et l'informatique quantique adiabatique.

### 2.4.1 Approximation de Born-Oppenheimer

Les concepts décrits dans cette section proviennent de [10].

Le calcul des fonctions d'onde pour un ensemble d'atomes est généralement impossible à résoudre. L'approximation de Born-Oppenheimer utilise la différence de masse entre les noyaux et les électrons d'une molécule pour résoudre séparément les deux mouvements et ainsi simplifier le problème. Les noyaux étant beaucoup plus lourds que les

électrons, ils se déplacent beaucoup plus lentement que ceux-ci. Ces déplacements sont adiabatiques pour les électrons.

Il faut commencer par résoudre l'équation du mouvement des électrons en fixant les distances relatives entre les noyaux  $\mathbf{r}$ . Nous trouvons ainsi une base dite adiabatique pour les électrons

$$\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}), \psi_3(\mathbf{r}), \psi_4(\mathbf{r}), \dots \quad (2.44)$$

$$E_1(\mathbf{r}), E_2(\mathbf{r}), E_3(\mathbf{r}), E_4(\mathbf{r}), \dots \quad (2.45)$$

Les électrons débutent dans l'état  $\psi_1(\mathbf{r})$  s'ils ne sont pas excités. L'énergie  $E_1(\mathbf{r})$  jouera le rôle d'une énergie potentielle à laquelle il faut rajouter l'énergie électromagnétique des noyaux

$$V(\mathbf{r}) = E_1(\mathbf{r}) + V_{em} \quad (2.46)$$

où  $V_{em}$  est l'énergie potentielle électromagnétique. Puisque les noyaux sont lourds, les particularités quantiques de la matière sont moins présentes. La solution classique de leurs positions représentera bien la réalité. Il est possible de calculer le mouvement des noyaux,  $\mathbf{r}_0(t)$ , de la méthode de notre choix : Lagrangienne, Hamiltonienne, lois de Newton. La fonction d'onde des électrons sera donc  $\psi_1(\mathbf{r}_0(t))$ .

Pour deux noyaux, nous avons

$$V(\mathbf{r}) = E_1(r) + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \quad (2.47)$$

où  $Z_i$  est le numéro atomique du noyau  $i$  et  $e^2 = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0}$ ,  $q$  la charge de l'électron,  $\epsilon_0$  la permittivité du vide. La figure 2.6 montre la forme de ce type de potentiel.

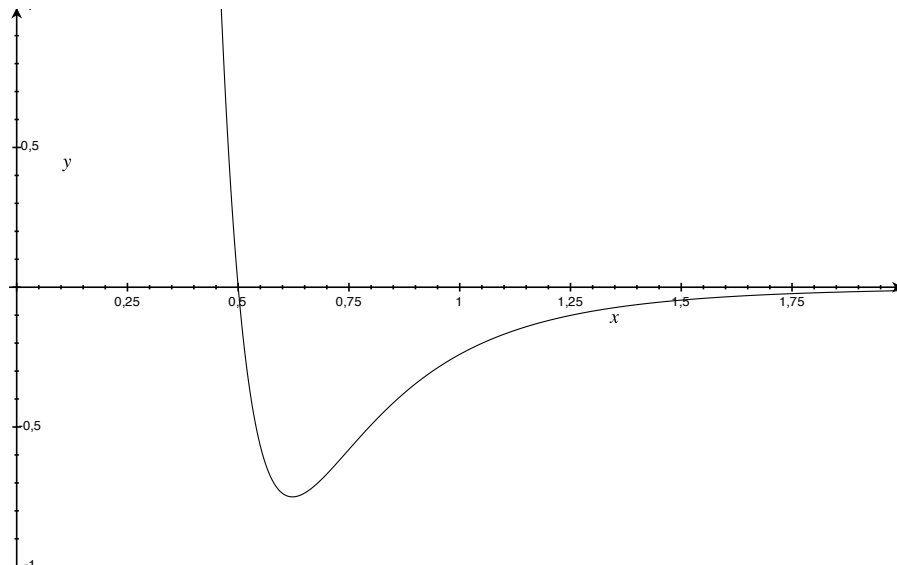


Figure 2.6 – Allure du potentiel entre deux noyaux. Le noyau oscillera autour du minimum du potentiel. Si les noyaux sont très éloignés, l'énergie potentielle entre eux devient nulle et ils sont libres.

## 2.4.2 Inversion de population de spins

L'inversion d'une population de spins est le fait d'avoir initialement des spins alignés à un champ magnétique et de faire des changements au système de manière à terminer avec des spins antiparallèle au champ. Cette idée est utilisée par l'imagerie par résonance magnétique.

Reprenons la situation présentée en 2.3.3 d'un champ magnétique tournant. Le système est constitué d'un champ magnétique  $\mathbf{B}_z$  en  $\hat{z}$  auquel est ajouté un champ magnétique tournant  $\mathbf{B}_x$ . Pour l'inversion de spins, il faut que  $\mathbf{B}_x$  soit faible et que sa fréquence soit variable.

$$\mathbf{B}(t) = B\hat{z} + \text{petit champ tournant} \quad (2.48)$$

Dans le référentiel tournant avec le champ magnétique, nous avons

$$\mathbf{B}'(t) = \frac{2}{\gamma}(\omega_0 - \omega)\hat{z} + \text{petit champ en } \hat{x}. \quad (2.49)$$

Nous augmentons  $\omega$  de manière adiabatique jusqu'à ce que  $\mathbf{B}'$  soit parallèle à  $-\hat{z}$ . Puisque l'évolution est adiabatique, le spin suit le champ magnétique. Lorsque  $\mathbf{B}'$  pointe vers le bas alors le spin l'est aussi et il est dans la direction inverse de  $\mathbf{B}$ . Cette évolution doit être faite dans un temps plus court que le temps de relaxation du système sinon le spin va évacuer l'énergie gagnée et se réaligner avec  $\mathbf{B}$ . Si nous appliquons cette technique à un ensemble de spin, il est dit que la population est inversée. Ce processus se nomme passage adiabatique rapide. Il peut être utilisé pour inverser la population des électrons d'un matériau créant ainsi un laser.

### 2.4.3 Informatique quantique adiabatique

Les concepts présentés ici proviennent de [11]. L'approximation adiabatique peut être utilisée comme notion de base pour solutionner le problème de la satisfiabilité d'un ensemble de qubits.<sup>5</sup> Nous cherchons une manière de satisfaire un maximum de clauses d'un groupe  $C_1, C_2, C_3, \dots, C_M$ . Une clause est une demande qui se répond par oui ou non. Une clause pourrait être : le premier qubit est 1, le premier et le deuxième qubit sont identiques, etc. Nous bâtissons une fonction d'énergie

$$h_a(q_1, q_2, \dots, q_L) = \begin{cases} 0 & \text{si } C_a \text{ est satisfaite} \\ 1 & \text{si } C_a \text{ est insatisfaite} \end{cases} \quad (2.50)$$

---

<sup>5</sup>Un qubit est simplement un système quantique à deux niveaux. Vous pouvez remplacer qubit par spin  $\frac{1}{2}$ .

où  $q_i$  est la valeur du qubit  $i$  (0 ou 1). Nous définissons le Hamiltonien problème à partir de  $h_a$

$$H_p = \sum_a h_a. \quad (2.51)$$

Plus l'énergie de cet Hamiltonien est basse et plus les clauses sont satisfaites. Commençons dans l'état de moindre énergie d'un Hamiltonien facile à créer et faisons-le évoluer vers  $H_p$

$$H(t) = (1 - f(t/T))H_i + f(t/T)H_p \quad (2.52)$$

où  $f(0) = 0$  et  $f(1) = 1$ . Si  $T$  est assez grand, l'évolution sera adiabatique et nous finirons dans l'état de moindre énergie de  $H_p$ . Nous aurons ainsi satisfait un maximum de clauses.

## CHAPITRE 3

### OPTIMISATION DU RÉSULTAT DE L'APPROXIMATION ADIABATIQUE POUR UN CAS PARTICULIER

L'optimisation de l'adiabaticité est un problème très complexe. Afin de le simplifier, seuls les systèmes ayant des énergies propres indépendantes du temps seront considérés dans ce chapitre.

#### 3.1 Mise en contexte

Soit un Hamiltonien connu et une particule dans un de ses états propres  $|n(0)\rangle$ . Notre but est de faire évoluer cet Hamiltonien initial vers un Hamiltonien final en un temps  $T$ , tout en maximisant la probabilité de terminer dans l'état  $|n(T)\rangle$ , *i.e.* d'être adiabatique. Les valeurs propres de  $H(t)$  doivent être indépendantes du temps. Mathématiquement, nous désirons trouver le  $H(t)$  qui répond aux conditions  $H(0) = H_i$  et  $H(T) = H_f$ , et qui maximise l'adiabaticité  $A(T)$ .

Un exemple d'intérêt est un champ magnétique en direction  $\hat{z}$  avec un spin parallèle et dont le champ magnétique final pointe dans une autre direction. Nous voulons déterminer quelle évolution du champ magnétique maximise la probabilité de conserver un spin parallèle au champ magnétique à la fin de l'expérience. Lors d'une évolution adiabatique, le spin suit le champ magnétique en tout temps. Pour une évolution quelconque, le spin ne réussit pas nécessairement à suivre le champ. Nous cherchons donc à conserver le résultat de l'approximation adiabatique à la fin de l'expérience seulement sans avoir de contrainte sur la lenteur du système. Pour que les énergies propres soient invariantes, il faut que la norme du champ magnétique reste inchangée.



### 3.2 Calcul variationnel

Cette méthode s'apparente à celle pour obtenir les équations d'Euler-Lagrange en mécanique classique. Voici les étapes du calcul :

1. supposer connaître l'évolution optimale ;
2. ajouter une petite variation qui ne change ni  $H_i$  ni  $H_f$  ;
3. insérer le tout dans la probabilité d'être adiabatique ;
4. développer en série autour du chemin optimal.

Tout comme les séries de Taylor, le terme d'ordre un doit être nul sur un extremum. Cette condition permet d'écrire le critère d'optimalité.

Puisque le Hamiltonien est une matrice hermitienne finie, il est possible de le diagonaliser. La matrice diagonale résultante sera composée des valeurs propres de  $H(t)$ . Les valeurs propres sont invariantes dans le temps ce qui nous permet de réécrire  $H(t)$  tel que

$$H(t) = V(t)H_i V^\dagger(t) \quad (3.1)$$

où  $V(t)$  est une matrice unitaire sans trace avec  $v(0) = \mathbb{1}$  et  $V(T)$  fixe. Nous supposons connaître l'évolution maximale et la notons par l'indice 0 :  $V_0(t)$ ,  $H_0(t) = V_0(t)H_i V_0^\dagger(t)$ ,  $U_0(t) = \hat{T} e^{-i \int_0^t H_0(t_1) dt_1}$ . Ajoutons une petite variation à  $V_0(t)$ . Pour conserver l'unitarité de  $V$ , l'ajout de la variation sera de la forme d'une matrice unitaire proche de l'identité

$$V(t) = e^{-ih(t)} V_0(t) \approx V_0(t) - ih(t) V_0(t) \quad (3.2)$$

où  $h(t)$  est une matrice hermitienne avec comme conditions limites  $h(0) = h(T) = 0$ . En réaction à cet ajout, l'opérateur d'évolution temporelle sera modifié. La matrice  $U(t)$

est unitaire et pour conserver cette qualité, il faut que la réaction de l'ajout le soit une matrice unitaire proche de l'identité

$$U(t) = e^{-ik(t)}U_0(t) \approx U_0(t) - ik(t)U_0(t) \quad (3.3)$$

où  $k(t)$  est une matrice hermitienne sans trace avec  $k(0) = 1$ . Il est à noter que  $h(t)$  est la variation que nous ajoutons au système tandis que  $k(t)$  est le changement causé par  $h(t)$  dans l'évolution du vecteur d'onde.

Insérons ces définitions dans  $A(T)$ .

$$\begin{aligned} A(T) &= |\langle n(T)|U(T)|n(0)\rangle|^2 \\ &\approx |\langle n(T)|U_0(T) - ik(T)U_0(T)|n(0)\rangle|^2 \\ &= \langle n(T)|U_0(T) - ik(T)U_0(T)|n(0)\rangle \langle n(0)|U_0(T)^\dagger + iU_0^\dagger(T)k(T)|n(T)\rangle \\ &= \langle n(T)|U_0(T)|n(0)\rangle \langle n(0)|U_0^\dagger(T)|n(T)\rangle \\ &\quad + \langle n(T)|U_0(T)|n(0)\rangle \langle n(0)|iU_0^\dagger(T)k(T)|n(T)\rangle \\ &\quad - \langle n(0)|U_0^\dagger(T)|n(T)\rangle \langle n(T)|ik(T)U_0(T)|n(0)\rangle \\ &\quad + O(k^2) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Les termes d'ordre  $k$  doivent être nuls parce que le développement de la série se fait autour d'un extremum. Le critère est donc :

$$\begin{aligned} &\langle n(T)|U_0(T)|n(0)\rangle \langle n(0)|iU_0^\dagger(T)k(T)|n(T)\rangle \\ &- \langle n(0)|U_0^\dagger(T)|n(T)\rangle \langle n(T)|ik(T)U_0(T)|n(0)\rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

Nous n'avons aucun contrôle sur  $k(t)$  contrairement à  $h(t)$  qui est la perturbation ajoutée. Ainsi, il est plus aisé de travailler avec  $h(t)$  plutôt que  $k(t)$ . En insérant (3.2) et

(3.3) dans l'équation (2.1), nous obtenons

$$\begin{aligned}
& i\dot{U}_0(t) + \dot{k}(t)U_0(t) + k(t)\dot{U}_0(t) \\
&= (V_0(t) - ih(t)V_0(t))H_i(V_0^\dagger + iV_0(t)^\dagger h(t))(U_0(t) - ik(t)U_0(t)) \\
&= V_0(t)H_i(t)V_0^\dagger(t)U_0(t) + i[V_0(t)H_i(t)V_0^\dagger(t), h(t)]U_0(t) \\
&\quad - iV_0(t)H_i(t)V_0^\dagger(t)k(t)U_0(t) + O(k^2)
\end{aligned} \tag{3.6}$$

Les premiers termes de chaque côté de l'équation s'annulent en utilisant (2.11) et les termes d'ordre  $k^2$  sont négligeables. Il ne reste plus qu'à isoler  $\dot{k}$

$$\dot{k}(t) = i[H_0(t), h(t)] - i[H_0(t), k(t)]. \tag{3.7}$$

Pour résoudre cette équation différentielle, il faut s'inspirer de la dynamique des opérateurs dans la représentation de Heisenberg,

$$i\dot{\gamma}(t) = [\gamma(t), H(t)] \Leftrightarrow \gamma(t) = U(t)\gamma(0)U^\dagger(t). \tag{3.8}$$

De manière analogue, la solution à (3.7) est

$$k(t) = i \int_0^t dt' U_0(t)U_0^\dagger(t')[H_0(t'), h(t')]U_0(t')U_0^\dagger(t) \tag{3.9}$$

ce qui peut être vérifié sans difficulté.

En introduisant cette définition dans (3.5), nous avons

$$\begin{aligned}
& \int_0^T dt' (\langle n(T) | U_0(T) | n(0) \rangle \langle n(0) | U_0^\dagger(t') [H_0(t'), h(t')] U_0(t') U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \\
& - \langle n(0) | U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \langle n(T) | U_0(T) U_0^\dagger(t') [H_0(t'), h(t')] U_0(t') | n(0) \rangle) = 0.
\end{aligned} \tag{3.10}$$

La perturbation  $h(t)$  étant une matrice hermitienne sans trace, elle peut être réécrite telle que

$$h(t) = \sum_j a_j(t) \lambda_j \quad (3.11)$$

où les  $\lambda_j$  sont une base pour les matrices hermitiennes sans trace. L'équation (3.10) devient ainsi

$$\sum_j \int_0^T dt' a_j(t') \left( \langle n(T) | U_0(T) | n(0) \rangle \langle n(0) | U_0^\dagger(t') [H_0(t'), \lambda_j] U_0(t') U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle - \langle n(0) | U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \langle n(T) | U_0(T) U_0^\dagger(t') [H_0(t'), \lambda_j] U_0(t') | n(0) \rangle \right) = 0. \quad (3.12)$$

La perturbation  $h(t')$  peut prendre n'importe quelle forme. L'équation (3.12) doit donc être valide pour n'importe quels  $a_j(t')$ , obligeant

$$\langle n(T) | U_0(T) | n(0) \rangle \langle n(0) | U_0^\dagger(t') [H_0(t'), \lambda_j] U_0(t') U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle - \langle n(0) | U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \langle n(T) | U_0(T) U_0^\dagger(t') [H_0(t'), \lambda_j] U_0(t') | n(0) \rangle = 0. \quad (3.13)$$

Ceci est le critère final qui peut être réécrit sous cette forme

$$\text{Re} \left( \langle n(T) | U_0(T) | n(0) \rangle \langle n(0) | U_0^\dagger(t) [H_0(t), \lambda_j] U_0(t) U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \right) = 0. \quad (3.14)$$

Il est possible d'interpréter les deux termes du critère. Pour le premier terme, nous avons

$$\langle n(T) | U_0(T) | n(0) \rangle = \langle n(T) | \Psi_0(T) \rangle. \quad (3.15)$$

La matrice  $U_0(T)$  fait évoluer l'état initial  $|n(0)\rangle$  jusqu'à la fin de l'expérience et cet état final  $|\Psi_0(T)\rangle$  est projeté sur l'état propre initial à la fin de l'expérience. Cette expression au carré donne la probabilité maximale d'être adiabatique, *i.e.* la valeur maximale de

l'adiabaticité. Le traitement du deuxième terme est semblable

$$\begin{aligned}
\langle n(0) | U_0^\dagger(t') [H(t'), \lambda_j] U_0(t') U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle &= \langle \Psi(t') | [H(t'), \lambda_j] U_0(t') U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \\
&= \langle \tilde{\Psi}(t') | U_0(t') U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \\
&= \langle \tilde{\Psi}(T) | n(T) \rangle.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

L'état initial est évolué jusqu'à un temps  $t'$  pour par après recevoir un effet de la perturbation  $h(t')$  et être évolué jusqu'au temps final,  $\langle \tilde{\Psi}(T) |$ .

Le but de chapitre est e trouver un critère qui nous indique quelle évolution  $H(t)$  est la plus adiabatique. Pour l'instant, nous ne sommes pas capable d'extraire de l'information de cette condition. Le critère dépend de  $H_0(t)$ , néanmoins ce qui nous complique la tâche est qu'il dépende aussi de l'opérateur d'évolution temporel,  $U_0(t)$ . Cet opérateur est un objet très complexe. Pour l'étudier, il faut intégrer (2.11)

$$U(t) = \mathbb{1} - i \int_0^t dt' H(t') U(t'). \tag{3.17}$$

La matrice d'évolution temporelle dépend de tous les  $U(t)$  et  $H(t)$  à des temps antérieurs. Puisque le critère d'adiabaticité est composé de cette matrice, il est donc dépendant de tous les  $U(t)$  et  $H(t)$  à des temps antérieurs. Malgré ces difficultés, le critère d'adiabaticité peut servir à désigner si une évolution est idéale du point de vue adiabatique.

### 3.3 Vérification

Dans cette section, une situation adiabatique mettra à l'épreuve le critère d'adiabaticité. Il est possible pour la situation décrite dans la section 2.3.3, un champ magnétique tournant autour d'un axe avec un spin parallèle au champ magnétique initialement, de choisir les paramètres du système pour avoir  $A(T) = 1$ . En incorporant cette situation

particulière au critère, nous vérifierons si il est en accord avec la solution analytique.

L'adiabaticité de cette situation est donné par (2.41)

$$A(t) = 1 - \left( \frac{\omega}{\bar{\omega}} \sin \frac{\bar{\omega}t}{2} \sin \theta \right)^2.$$

Ajustons les paramètres du système pour être totalement adiabatique

$$\sin \frac{\bar{\omega}T}{2} = 0 \iff T = \frac{2\pi k}{\bar{\omega}} \quad k \in \mathbb{Z}. \quad (3.18)$$

Nous pouvons maintenant déterminer le Hamiltonien final, ses états propres et la matrice d'évolution temporelle :

$$\begin{aligned} H_i = -\frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} &\rightarrow H_f = -\frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{2k\pi i \omega / \bar{\omega}} \\ \sin \theta e^{-2k\pi i \omega / \bar{\omega}} & -\cos \theta \end{pmatrix}, \\ |0(0)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} &\rightarrow |0(T)\rangle = \begin{pmatrix} e^{k\pi i \omega / \bar{\omega}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-k\pi i \omega / \bar{\omega}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ |1(0)\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} &\rightarrow |1(T)\rangle = \begin{pmatrix} e^{k\pi i \omega / \bar{\omega}} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-k\pi i \omega / \bar{\omega}} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \\ U(T) = \begin{pmatrix} e^{i\omega T/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega T/2} \end{pmatrix}. & \end{aligned} \quad (3.19)$$

Il ne reste plus qu'à insérer ces informations dans le critère d'optimisation (3.14).

Cette situation a pour propriété que si le spin débute parallèlement au champ magnétique, alors il le sera à la fin de l'expérience

$$U(T)|0(0)\rangle = \begin{pmatrix} e^{i\omega T/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega T/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\omega T/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\omega T/2} \end{pmatrix} = |0(T)\rangle. \quad (3.20)$$

Puisque cette base d'état propre instantané est orthonormée, le premier terme de (3.14) est

$$\langle n(T)|U_0(T)|n(0)\rangle = \langle n(T)|n(T)\rangle = 1. \quad (3.21)$$

Cela nous permet de réécrire le critère tel que

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Re}\left(\langle n(T)|U_0(T)|n(0)\rangle \langle n(0)|U_0^\dagger(t')[H_0(t), \lambda_j]U_0(t)U_0^\dagger(T)|n(T)\rangle\right) \\ &= \text{Re}\left(\langle n(0)|U_0^\dagger(t')[H_0(t), \lambda_j]U_0(t)|n(0)\rangle\right) \quad \forall j, t. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Le critère est toujours satisfait puisque le terme  $\langle n(0)|U_0^\dagger(t')[H_0(t), \lambda_j]U_0(t)|n(0)\rangle$  est imaginaire

$$\left(\langle n(0)|U_0^\dagger(t')[H_0(t), \lambda_j]U_0(t)|n(0)\rangle\right)^\dagger = -\langle n(0)|U_0^\dagger(t')[H_0(t), \lambda_j]U_0(t)|n(0)\rangle. \quad (3.23)$$

Ainsi, le critère d'adiabaticité indique que cette situation optimise l'adiabaticité ce que nous savions déjà par sa solution générale. Cette réussite donne confiance quant à la validité du travail présenté dans ce chapitre.

## CHAPITRE 4

### GÉNÉRALISATION

Le calcul variationnel peut s'étendre à d'autres situations. Dans ce chapitre, il sera tenté d'optimiser la probabilité de débiter avec le vecteur d'onde  $|\Psi_i\rangle$  et de terminer avec  $|\Psi_f\rangle$  sachant que les systèmes initial et final sont respectivement donnés par  $H_i$  et  $H_f$ . Il n'y a plus de contrainte sur les valeurs propres et les états initial et final. En choisissant  $|\Psi_i\rangle = |n(0)\rangle$  et  $|\Psi_f\rangle = |n(T)\rangle$ , nous optimisons l'adiabaticité comme dans le chapitre 3. Le traitement mathématique est semblable à celui du chapitre précédent.

#### 4.1 Calcul variationnel

Remplaçons l'adiabaticité par  $\beta(T) = |\langle \Psi_f | \Psi(T) \rangle|^2$  qui est la probabilité de terminer avec l'état  $|\Psi_f\rangle$ . Supposons connaître l'évolution optimale  $H_0(t)$  et ajoutons-y une petite variation

$$H(t) = H_0(t) + h(t) \quad (4.1)$$

où  $h(t)$  est une matrice hermitienne obéissant aux conditions  $h(0) = h(T) = 0$ . Cette  $h(t)$  est différente de celle introduite au chapitre 3. Cette matrice a une trace non-nulle et a des unités d'énergie. Dans le chapitre précédent,  $h(t)$  était de trace nulle et sans unité. Puisque  $H(t)$  est proche de  $H_0(t)$ , alors  $U(t)$  sera proche de  $U_0(t)$ . La variation de l'opérateur d'évolution temporelle est sous forme d'une matrice unitaire, pour conserver l'unitarité de  $U(t)$ , près de l'identité

$$U(t) = e^{-ik(t)} U_0(t) \approx U_0(t) - ik(t) U_0(t) \quad (4.2)$$

où  $k(t)$  est une matrice hermitienne sans trace avec  $k(0) = 0$ .



Insérons maintenant (4.2) dans  $\beta(T)$ ,

$$\begin{aligned}
\beta(T) &= |\langle \Psi_f | U(T) | \Psi_i \rangle|^2 \\
&\approx |\langle \Psi_f | U_0(T) - ik(T)U_0(T) | \Psi_i \rangle|^2 \\
&= \langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \\
&\quad + \langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | iU_0^\dagger(T)k(T) | \Psi_f \rangle \\
&\quad - \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \langle \Psi_f | ik(T)U_0(T) | \Psi_i \rangle \\
&\quad + O(k^2). \tag{4.3}
\end{aligned}$$

Le critère d'optimisation de  $\beta(T)$  découle du terme d'ordre  $k$  qui doit être nul. Trouvons le lien entre  $h(t)$  et  $k(t)$  afin de réécrire les termes du critère en fonction de  $h(t)$ . À l'aide de (2.11), (4.1) et (4.2), nous trouvons que

$$\begin{aligned}
&i\dot{U}_0(t) + \dot{k}(t)U_0(t) + k(t)\dot{U}_0(t) \\
&= (H_0(t) + h(t))(U_0(t) - ik(t)U_0(t)) \\
&= H_0(t)U_0(t) - iH_0(t)k(t)U_0(t) + h(t)U_0(t) + O(k^2). \tag{4.4}
\end{aligned}$$

Utilisons (2.11), négligeons les termes d'ordre deux et isolons  $\dot{k}$  pour obtenir

$$\dot{k}(t) = h(t) - i[H_0(t), k(t)]. \tag{4.5}$$

Cette équation différentielle n'est pas identique à celle du chapitre 3 et a pour solution

$$k(t) = \int_0^t dt' U_0(t) U_0^\dagger(t') h(t') U_0(t') U_0^\dagger(t). \tag{4.6}$$

Il est facile de vérifier cette solution en l'introduisant dans (4.5). Nous pouvons mainte-

nant substituer  $k(t)$  par (4.6) dans le terme d'ordre un de (4.3),

$$\int_0^T dt' \left( \langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(t') h(t') U_0(t') U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \right. \\ \left. - \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \langle \Psi_f | U_0(T) U_0^\dagger(t') h(t') U_0(t') | \Psi_i \rangle \right) = 0. \quad (4.7)$$

La perturbation  $h(t')$  étant une matrice hermitienne, elle peut être réécrite telle que

$$h(t) = \sum_{\mu=0}^n a_\mu(t) \lambda_\mu \quad (4.8)$$

où les  $\lambda_\mu$  forment une base pour les matrices hermitiennes de dimension  $n$ . Ceci permet de réécrire le critère tel que

$$\int_0^T dt' a_\mu(t') \left( \langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(t') \lambda_\mu U_0(t') U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \right. \\ \left. - \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \langle \Psi_f | U_0(T) U_0^\dagger(t') \lambda_\mu U_0(t') | \Psi_i \rangle \right) = 0. \quad (4.9)$$

Puisque (4.9) doit être satisfaite pour n'importe quel  $h(t')$ , et donc pour n'importe quel  $a_\mu(t')$ , alors le coefficient de ces derniers doivent être nuls à tout temps impliquant

$$\langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(t') \lambda_\mu U_0(t') U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \\ - \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \langle \Psi_f | U_0(T) U_0^\dagger(t') \lambda_\mu U_0(t') | \Psi_i \rangle = 0. \quad (4.10)$$

Ceci est le critère d'optimisation final pour  $\beta(T)$ . Il est possible de le réécrire tel que

$$\text{Im} \left( \langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(t) \lambda_\mu U_0(t) U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \right) = 0. \quad (4.11)$$

L'application de ce critère semble plus aisé que celui du chapitre précédent puisqu'il ne dépend que de  $U_0(t')$ . Si nous parvenions à déterminer  $U_0(t)$ , nous pourrions ensuite

utiliser (2.11) pour calculer  $H_0(t)$ . Malheureusement, les difficultés soulevées au chapitre 3 sont toujours présentes. Les  $U(t)$  dépendent de tous les  $U(t')$  à des temps précédents. Le critère à donc la même dépendance ce qui le rend très complexe.

## 4.2 Exemple

Voici un exemple qui illustre les difficultés du critère. Nous essaierons pour un cas particulier de calculer  $U_0(t)$  et par après  $H_0(t)$ .

Reprenons la situation décrite aux sections 2.3.3 et 3.3. Soit un champ magnétique pointant en  $\hat{z}$ , finissant en  $-\hat{z}$  et un spin parallèle dans les deux situations. Pour cette exemple,  $\beta$  est l'adiabaticité.

$$H_i = -\frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow H_f = -\frac{\omega_0}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

$$|\Psi_i\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\Psi_f\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

De manière générale,  $U(t)$  est une matrice unitaire qui peut s'écrire comme ceci

$$U_0(t) = e^{i\alpha(t)} \begin{pmatrix} p_1(t) + ip_2(t) & p_3(t) + ip_4(t) \\ -p_3(t) + ip_4(t) & p_1(t) - ip_2(t) \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

où les  $p_j(t)$  et  $\alpha(t)$  sont des paramètres réels ayants pour condition  $\sum_{j=1}^4 p_j^2(t) = 1$ . La phase de  $U_0(t)$  n'est pas importante parce qu'elle va s'annuler avec celle d'un  $U_0^\dagger(t)$  dans le critère. Ainsi, il n'est pas nécessaire de se préoccuper de cette phase.

Nous savons que (4.11) possède deux inconnus,  $U_0(t)$  et  $U_0(T)$ . Premièrement, solutionnons le critère à  $t = T$  pour déterminer  $U_0(T)$ . Par après, nous déterminerons  $U_0(t)$ .

Pour  $t = T$ , le critère d'optimisation est

$$\text{Im}\left(\langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) \lambda_\mu | \Psi_f \rangle\right) = 0. \quad (4.15)$$

Calculons le terme  $\langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle$ .

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1(T) + ip_2(T) & p_3(T) + ip_4(T) \\ -p_3(T) + ip_4(T) & p_1(T) - ip_2(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -p_3(T) + ip_4(T) \quad (4.16)$$

Évaluons maintenant le deuxième terme de (4.15) pour toutes les valeurs de  $\lambda_\mu$ .

$$\lambda_0 = \mathbb{1}.$$

$$\text{Im}\left(\langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle\right) = \text{Im}|\langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle|^2 = 0 \quad (4.17)$$

Comme cette équation est toujours valide, aucune information ne peut y être soustraite.

$$\lambda_3 = \sigma_z.$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1(T) + ip_2(T) & p_3(T) + ip_4(T) \\ -p_3(T) + ip_4(T) & p_1(T) - ip_2(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -p_3(T) + ip_4(T) \quad (4.18)$$

En combinant avec (4.16) et en ne conservant que la partie imaginaire, nous obtenons

$$p_3(T)p_4(T) = 0 \quad \Rightarrow \quad p_3(T) = 0 \text{ ou } p_4(T) = 0. \quad (4.19)$$

$$\lambda_1 = \sigma_x.$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1(T) + ip_2(T) & p_3(T) + ip_4(T) \\ -p_3(T) + ip_4(T) & p_1(T) - ip_2(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = p_1(T) - ip_2(T) \quad (4.20)$$

Ce résultat inséré dans (4.15) permet d'obtenir

$$p_2(T)p_3(T) + p_1(T)p_4(T) = 0. \quad (4.21)$$

$$\lambda_2 = \sigma_y.$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1(T) + ip_2(T) & p_3(T) + ip_4(T) \\ -p_3(T) + ip_4(T) & p_1(T) - ip_2(T) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = p_2(T) + ip_1(T) \quad (4.22)$$

De la même manière, nous avons pour  $\lambda_2 = \sigma_y$

$$p_1(T)p_3(T) = p_2(T)p_4(T) \quad (4.23)$$

En résumé, le système d'équations décrivant  $U_0(T)$  est

$$\begin{aligned} p_1(T)p_3(T) &= p_2(T)p_4(T), \\ p_3(T)p_4(T) &= 0, \\ p_2(T)p_3(T) + p_1(T)p_4(T) &= 0, \\ p_1^2(T) + p_2^2(T) + p_3^2(T) + p_4^2(T) &= 1. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Il y a trois solutions à ce système

$$U_0(T) = \pm \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \pm \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} p_1(T) + ip_2(T) & 0 \\ 0 & p_1(T) - ip_2(T) \end{pmatrix}. \quad (4.25)$$

La dernière possibilité est à éliminer car elle représente un spin restant dans l'état  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$

ou encore  $\beta(T) = A(T) = 0$ .

À présent, incorporons ces informations dans (4.11) dans le but de déterminer  $U_0(t')$ . On peut montrer que le choix de la forme de  $U_0(T)$  ne modifie pas la valeur des termes composants le critère. Pour fixer les idées, posons

$$U_0(T) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

Cette situation a comme propriété

$$U_0^\dagger(T)|\Psi_f\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\Psi_i\rangle \quad (4.27)$$

Par conséquent, (4.11) devient

$$\text{Im}\left(\langle\Psi_i|U_0^\dagger(t)\lambda_\mu U_0(t)|\Psi_i\rangle\right) = 0. \quad (4.28)$$

Cette équation est toujours valide parce que le terme entre parenthèse est réel

$$\langle\Psi_i|U_0^\dagger(t)\lambda_\mu U_0(t)|\Psi_i\rangle^\dagger = \langle\Psi_i|U_0^\dagger(t)\lambda_\mu U_0(t)|\Psi_i\rangle. \quad (4.29)$$

Il nous est donc impossible de tirer de l'information sur  $U_0(t)$ .

Tout ce travail montre que pour cette situation, le critère d'optimisation ne permet pas de déterminer  $U_0(t)$  ou  $H_0(t)$ . Malgré cet échec, nous croyons que pour d'autres situations le critère d'optimisation peut déterminer l'évolution optimale.

### 4.3 Vérification

Plutôt que d'étudier une situation particulière, nous allons considérer d'un coup tous les cas où  $\beta(T) = 1$ . Avec cette condition,

$$U_0(T)|\Psi_i\rangle = |\Psi_f\rangle \quad (4.30)$$

ce qui permet d'écrire le critère tel que

$$0 = \text{Im}\left(\langle\Psi_f|\Psi_f\rangle\langle\Psi_i|U_0^\dagger(t')\lambda_\mu U_0(t')|\Psi_i\rangle\right). \quad (4.31)$$

L'équation (4.31) est toujours valide puisque le terme entre parenthèse est réel. Il en découle que le critère sera toujours respecté si l'évolution est optimale.

## CHAPITRE 5

### CONCLUSION

Suite à une brève introduction à la mécanique quantique, au théorème adiabatique, à l'approximation adiabatique et ses limitations, de son utilité dans trois domaines, nous avons tenté de maximiser la probabilité d'être adiabatique connaissant le système initial, le système final voulu et le temps d'évolution total.

Pour des systèmes où les énergies propres sont indépendantes du temps et avec l'aide de la méthode variationnelle, un critère sur l'évolution adiabatique idéale a été obtenu

$$\text{Re} \left( \langle n(T) | U_0(T) | n(0) \rangle \langle n(0) | U_0^\dagger(t) [H_0(t), \lambda_\mu] U_0(t) U_0^\dagger(T) | n(T) \rangle \right) = 0.$$

En principe cette relation devrait nous permettre de déterminer  $H_0(t)$ . Malheureusement, ce calcul est trop complexe. Le critère d'optimisation dépend de l'opérateur d'évolution temporel  $U(t)$  qui dépend de tous les  $U(t')$  qui le précèdent. Ceci nous empêche de déterminer les évolutions les plus adiabatiques. Le critère peut néanmoins déterminer si une évolution est la plus adiabatique possible.

La même méthode peut être utilisée pour maximiser la probabilité de passer d'un vecteur d'onde initial vers un vecteur d'onde final connaissant les Hamiltoniens respectifs et le temps total de l'évolution. Les valeurs propres peuvent maintenant varier dans le temps. De plus, les vecteurs d'onde initial et final ne sont pas bornés à un état propre en particulier et n'ont pas nécessairement de lien entre eux. Ils peuvent être un mélange d'états propres. Un critère sur l'évolution maximisant la probabilité de finir avec le vecteur d'onde voulu a été obtenu

$$0 = \text{Im} \left( \langle \Psi_f | U_0(T) | \Psi_i \rangle \langle \Psi_i | U_0^\dagger(t) \lambda_\mu U_0(t) U_0^\dagger(T) | \Psi_f \rangle \right).$$



Ce critère est aussi complexe que celui plus haut. Nous ne sommes pas encore capable de déterminer l'évolution idéale pour ce cas mais il est possible de déterminer si une évolution  $U(t)$  l'est.

En conclusion, cette dérivation est élégante, innovatrice et digne d'intérêt. Malgré les difficultés du critère, nous ne sommes pas convaincus qu'il soit impossible d'extirper plus d'information. La question reste ouverte.

## Annexe I

### Preuve du théorème adiabatique

Nous suivrons de près la preuve donnée dans [12].

Soit un système composé d'un Hamiltonien initial qui évolue vers un Hamiltonien final en un temps  $T$  :

$$i|\dot{\Psi}(t)\rangle = H(t/T)|\Psi(t)\rangle \quad (\text{I.1})$$

où  $t \in [0, T]$ ,  $H(0) = H_i$  et  $H(1) = H_f$ . Faisons le changement de variable  $s = t/T$  pour faire ressortir la dépendance sur le temps total de l'expérience. (I.1) devient

$$\frac{i}{T}|\dot{\phi}(s)\rangle = H(s)|\phi(s)\rangle \quad (\text{I.2})$$

où  $\phi(s) = \Psi(tT)$ .

Cet Hamiltonien doit avoir un état propre instantané  $|\Phi(s)\rangle$  avec une énergie propre  $E(s)$  non-dégénérée. Le système débute dans cet état propre.

Si l'évolution est infiniment lente, *i.e.*  $T \rightarrow \infty$ , alors le système restera dans l'état propre  $|\Phi(s)\rangle$ .

**Lemme.** Supposons une fonction d'onde  $|\tilde{\phi}(s)\rangle$  qui répond presque à l'équation de Schrödinger

$$|\tilde{\chi}(s)\rangle = \frac{i}{T}|\dot{\tilde{\phi}}(s)\rangle - H(s)|\tilde{\phi}(s)\rangle. \quad (\text{I.3})$$

Si  $\|\tilde{\chi}(s)\| \leq \mu(s, T)$ , alors  $|\tilde{\phi}(s)\rangle$  est une solution de (I.2) avec une erreur bornée par

$$T \int_0^s ds' \mu(s', T). \quad (\text{I.4})$$

*Démonstration.* La norme de l'erreur peut être donnée par

$$\begin{aligned}
\Delta &= \|\tilde{\phi}(s) - U(s)\tilde{\phi}(0)\| \\
&= \|U^\dagger(s)\tilde{\phi}(s) - \tilde{\phi}(0)\| \\
&= \left\| \int_0^s ds' \frac{d}{ds'} (U^\dagger(s')\tilde{\phi}(s')) \right\| \\
&= \left\| \int_0^s ds' U^\dagger(s') (iTH(s')\tilde{\phi}(s') + \dot{\tilde{\phi}}(s')) \right\| \\
&\leq T \int_0^s ds' \mu(s', T) \quad \square
\end{aligned}$$

**Théorème adiabatique.** L'équation de Schrödinger a une solution de la forme

$$e^{iT \int_0^s ds' E(s')} (|\Phi(s)\rangle + O(T^{-1})). \quad (\text{I.5})$$

*Démonstration.* Supposons que l'équation de Schrödinger ait une solution de cette forme

$$e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left[ |\phi_0(s)\rangle + \frac{|\phi_1(s)\rangle}{T} + \frac{|\phi_2(s)\rangle}{T^2} + \dots + \frac{|\phi_j(s)\rangle}{T^j} + \dots \right]. \quad (\text{I.6})$$

Insérons (I.6) dans (I.2) pour obtenir

$$\frac{i}{T} \left[ |\dot{\phi}_0(s)\rangle + \frac{|\dot{\phi}_1(s)\rangle}{T} + \frac{|\dot{\phi}_2(s)\rangle}{T^2} + \dots \right] = [H(s) - E(s)] \left[ |\phi_0(s)\rangle + \frac{|\phi_1(s)\rangle}{T} + \frac{|\phi_2(s)\rangle}{T^2} + \dots \right]. \quad (\text{I.7})$$

Cette dernière égalité sera valide si les termes d'un même ordre s'annulent.

**Ordre 0 :** Les termes d'ordre  $T^{-0}$  doivent obéir à

$$[H(s) - E(s)]|\phi_0(s)\rangle = 0. \quad (\text{I.8})$$

Il faut donc que

$$|\phi_0(s)\rangle = f_0(s)|\Phi(s)\rangle \quad (\text{I.9})$$

où  $f_0(s)$  est une fonction inconnue pour l'instant.

**Ordre 1** : Les termes d'ordre  $T^{-1}$  doivent obéir à

$$if_0(s)|\Phi(s)\rangle + if_0(s)|\dot{\Phi}(s)\rangle = [H(s) - E(s)]|\phi_1(s)\rangle. \quad (\text{I.10})$$

Le choix de base  $\langle m(t)|\dot{m}(t)\rangle = 0$ , rend perpendiculaire un état et sa dérivée. Ainsi, il faut décomposer  $|\phi_1(s)\rangle$  dans la direction parallèle à  $|\Phi(s)\rangle$  et dans la direction de  $|\dot{\Phi}(s)\rangle$  :

$$|\phi_1(s)\rangle = |\phi_1^{\parallel}(s)\rangle + |\phi_1^{\perp}(s)\rangle \quad (\text{I.11})$$

À l'aide de cette décomposition, nous obtenons deux équations de (I.10) :

$$if_0(s)|\Phi(s)\rangle = [H(s) - E(s)]|\phi_1^{\parallel}(s)\rangle = 0, \quad (\text{I.12})$$

$$if_0(s)|\dot{\Phi}(s)\rangle = [H(s) - E(s)]|\phi_1^{\perp}(s)\rangle. \quad (\text{I.13})$$

De la première équation, nous trouvons que

$$\dot{f}_0(s) = 0 \quad (\text{I.14})$$

impliquant que  $f_0$  est une constante. Elle doit être égale à un pour satisfaire la condition initiale ; débiter dans l'état  $|\Phi(s)\rangle$ .

Nous pouvons continuer ainsi pour chaque ordre et notre ansatz deviendra une solution exacte à l'équation de Schrödinger.

Il faut maintenant insérer (I.6) dans (I.2) et isoler les termes d'ordre zéro et un.

$$\begin{aligned} & \frac{i}{T} \frac{d}{ds} \left[ e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( |\phi_0(s)\rangle + \frac{|\phi_1(s)\rangle}{T} \right) \right] - H(s) \left[ e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( |\phi_0(s)\rangle + \frac{|\phi_1(s)\rangle}{T} \right) \right] \\ &= \frac{-i}{T} \frac{d}{ds} \left[ e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( \frac{|\phi_2(s)\rangle}{T^2} + \frac{|\phi_3(s)\rangle}{T^3} + \dots \right) \right] + H(s) \left[ e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( \frac{|\phi_2(s)\rangle}{T^2} + \frac{|\phi_3(s)\rangle}{T^3} + \dots \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{I.15})$$

Pour ce cas, nous avons

$$|\tilde{\phi}(s)\rangle = e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( |\phi_0(s)\rangle + \frac{|\phi_1(s)\rangle}{T} \right) \quad (\text{I.16})$$

$$\begin{aligned} |\tilde{\chi}(s)\rangle &= \frac{-i}{T} \frac{d}{ds} \left[ e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( \frac{|\phi_2(s)\rangle}{T^2} + \frac{|\phi_3(s)\rangle}{T^3} + \dots \right) \right] \\ &+ H(s) \left[ e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( \frac{|\phi_2(s)\rangle}{T^2} + \frac{|\phi_3(s)\rangle}{T^3} + \dots \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{I.17})$$

$|\tilde{\chi}(s)\rangle$  est composé de trois termes bornés d'ordre  $T^{-2}$  ou plus. Nous pouvons donc utiliser le lemme et affirmer que

$$e^{iT \int_0^s ds' E(s')} \left( |\phi_0(s)\rangle + \frac{|\phi_1(s)\rangle}{T} \right) \quad (\text{I.18})$$

est une solution à l'équation de Schrödinger avec une erreur de l'ordre de  $T^{-1}$ . La solution à (I.2) a ainsi la forme

$$e^{iT \int_0^s ds' E(s')} (|\Phi(s)\rangle + O(T^{-1})). \quad \square$$

Pour compléter la preuve du théorème adiabatique, il faut prendre la limite  $T \rightarrow \infty$ . Le terme d'ordre  $T^{-1}$  devient nul pour ne laisser que

$$e^{i\infty} |\Phi(s)\rangle. \quad (\text{I.19})$$

Cette exponentielle n'est pas définie mais elle ne contribue pas à la probabilité d'être dans un état. Ainsi, lorsque l'évolution est infiniment lente, le système se maintient dans le même état propre qu'initialement, sauf qu'il est impossible de déterminer exactement la fonction d'onde.

## Annexe II

### Preuve d'une identité des matrices $\sigma$

Prouvons cette identité

$$e^{i\hat{a}\cdot\sigma} = \cos a + i\hat{a}\cdot\sigma \sin a \quad (\text{II.1})$$

où  $\hat{a} = n_1\hat{x} + n_2\hat{y} + n_3\hat{z}$ .

*Démonstration.* Rappelons que

$$\sigma_j\sigma_k = i\varepsilon_{jkl}\sigma_l \quad \text{si } j \neq k, \quad (\text{II.2})$$

$$\sigma_j^2 = \mathbb{1}. \quad (\text{II.3})$$

Une puissance paire de  $\hat{a}\cdot\sigma$  donne

$$\begin{aligned} (\hat{a}\cdot\sigma)^{2m} &= (\hat{a}\cdot\sigma\hat{a}\cdot\sigma)^m \\ &= \left(\sum_j \sum_k n_j n_k \sigma_j \sigma_k\right)^m \\ &= \left(\sum_j n_j^2 + \sum_{j \neq k} \varepsilon_{jkl} \sigma_l\right)^m \\ &= (\mathbb{1} + 0)^m = \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

La dernière ligne est justifié par l'antisymétrie du tenseur  $\varepsilon_{jkl}$ . Il s'ensuit que les puissances impaires valent

$$\begin{aligned} (\hat{a}\cdot\sigma)^{2m+1} &= (\hat{a}\cdot\sigma)^{2m}(\hat{a}\cdot\sigma) \\ &= \hat{a}\cdot\sigma. \end{aligned} \quad (\text{II.5})$$

Développons l'exponentielle en série, séparons les termes en cosinus et sinus, et utilisons (II.4) et (II.5).

$$\begin{aligned} e^{ia \cdot \sigma} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (a\hat{a} \cdot \sigma)^{2n}}{(2n)!} + i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (a\hat{a} \cdot \sigma)^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n a^{2n}}{(2n)!} + i\hat{a} \cdot \sigma \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n a^{2n+1}}{(2n+1)!} \\ &= \cos a + i\hat{a} \cdot \sigma \sin a \end{aligned}$$

□



## BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. Born and V. Fock. Beweis des adiabatenatzes. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 51 :165–180, 1928. 10.1007/BF01343193.
- [2] Karl-Peter Marzlin and Barry C. Sanders. Inconsistency in the Application of the Adiabatic Theorem. Phys. Rev. Lett., 93 :160408, 2004.
- [3] R. MacKenzie, A. Morin-Duchesne, H. Paquette, and J. Pinel. Validity of the adiabatic approximation in quantum mechanics. Phys. Rev. A, 76(4) :044102, Oct 2007.
- [4] R. MacKenzie, E. Marcotte, and H. Paquette. Perturbative approach to the adiabatic approximation. Phys. Rev. A, 73(4) :042104, Apr 2006.
- [5] D. M. Tong. Quantitative condition is necessary in guaranteeing the validity of the adiabatic approximation. Phys. Rev. Lett., 104(12) :120401, Mar 2010.
- [6] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, and C. H. Oh. Sufficiency criterion for the validity of the adiabatic approximation. Phys. Rev. Lett., 98(15) :150402, Apr 2007.
- [7] D. M. Tong, K. Singh, L. C. Kwek, and C. H. Oh. Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation. Phys. Rev. Lett., 95(11) :110407, Sep 2005.
- [8] D. Comparat. General conditions for a quantum adiabatic evolution. ArXiv e-prints, June 2009.
- [9] A. T. Rezakhani, W.-J. Kuo, A. Hamma, D. A. Lidar, and P. Zanardi. Quantum adiabatic brachistochrone. Phys. Rev. Lett., 103(8) :080502, Aug 2009.

- [10] Claude Cohen-Tannoudji, Franck Laloe, and Bernard Diu. Mecanique quantique [par] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu [et] Franck Laloe. Hermann [Paris], 1973.
- [11] E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann, and M. Sipser. Quantum Computation by Adiabatic Evolution. ArXiv Quantum Physics e-prints, January 2000.
- [12] Georges A. Hagedorn. A Variety of Mathematical Results in Adiabatic Quantum Mechanics. Perimeter Institute, 2006.