

Université de Montréal

Étude sur la Validité de l'Approximation Adiabatique

par
Julien Pinel

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, 2006

© Julien Pinel, 2006.



dc

3

U54

2007

v.05

10/12/07

AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé:

Étude sur la Validité de l'Approximation Adiabatique

présenté par:

Julien Pinel

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes:

Manu Paranjape
président-rapporteur

Richard MacKenzie
directeur de recherche

David London
membre du jury

Mémoire accepté le

RÉSUMÉ

Ce mémoire porte sur une méthode d'approximation connue en mécanique quantique, qui sert à estimer l'état quantique d'un système pour lequel on ne peut résoudre l'équation de *Schrödinger* : l'*approximation adiabatique*.

Plus précisément, dans ce mémoire, nous considérons un nouveau développement servant à écrire l'état quantique d'un système comme une série ; un développement permettant une interprétation nouvelle et élégante des termes le constituant. L'étude de la convergence de ce nouveau développement nous amène à considérer les conditions de validité de l'approximation adiabatique. Entre autres, nous pouvons observer le rôle du temps sur la validité de l'approximation adiabatique et en conclure que celle-ci n'est valide que pour une certaine durée de temps. Mais la durée de temps pendant laquelle l'approximation adiabatique est valide varie selon la *lenteur* avec laquelle le système sous étude évolue ; et ce d'une façon qui respecte l'idée de l'approximation adiabatique.

Également, nous commentons une récente controverse portant sur la conception "conventionnelle" (i.e. habituelle, acceptée) de l'approximation adiabatique. Plus précisément, certains chercheurs ont récemment remis en question la validité du critère "standard" supposé nous indiquer s'il est correct d'utiliser l'approximation adiabatique pour estimer l'état quantique du système qu'on étudie. Nous analysons leur argument en nous plaçant dans le cadre d'un système concret, ce qui nous permet de comprendre certaines subtilités du lien qui unit le critère "standard" et l'approximation adiabatique.

Mots-clés : physique théorique des particules, mécanique quantique, théorème adiabatique, approximation adiabatique.

ABSTRACT

In this thesis we study a well-established approximation method in quantum mechanics used to estimate the quantum state of a system for which we cannot solve the *Schrödinger* equation: the *adiabatic approximation*.

More precisely, we consider a new way to write the quantum state of a system as an expansion that yields a new, intuitive and elegant interpretation. The study of the convergence of this expansion allows us to investigate under which circumstances the use of the adiabatic approximation is justified. Among other things, we can observe the influence of the duration of the time evolution of the system on the validity of the adiabatic approximation, from which we conclude that it is not valid for all time, but only for a certain limited time interval. Nevertheless, the time duration for which the adiabatic approximation is valid varies with the *slowness* of the time evolution, in a way which agrees with our intuitive notion of the adiabatic approximation.

Also, we comment on a recent controversy about the conventional approach to the adiabatic approximation. More precisely, some researchers have claimed that a "standard" criterion of validity of the adiabatic approximation is in fact insufficient, concluding that the adiabatic theorem has an "inconsistency". We analyse their argument in the context of a concrete system, allowing us to understand the subtleties of the connection between the "standard" criterion and the adiabatic approximation (the connection being less direct than claimed by these researchers).

keywords: theoretical particle physics, quantum mechanics, adiabatic theorem, adiabatic approximation.

TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ	iii
ABSTRACT	iv
TABLE DES MATIÈRES	v
LISTE DES FIGURES	vii
REMERCIEMENTS	viii
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 : DU THÉORÈME ADIABATIQUE À L'APPROXI- MATION ADIABATIQUE	3
1.1 Vers l'approximation adiabatique	5
1.2 Précisions sur l'utilisation du critère	9
1.3 Analyse d'un exemple concret	11
1.4 En terminant le portrait de l'approximation adiabatique	20
CHAPITRE 2 : UN NOUVEAU DÉVELOPPEMENT PERTURBA- TIF POUR ÉTUDIER L'APPROXIMATION ADIA- BATIQUE	21
2.1 Présentation du développement	21
2.2 Lien avec le développement conventionnel	26
2.3 En résumé	28
CHAPITRE 3 : LA CONVERGENCE DU DÉVELOPPEMENT ET L'INFLUENCE DU TEMPS SUR L'APPROXIMA- TION ADIABATIQUE	29
3.1 Description du type de système analysé	30
3.2 Analyse de la convergence du développement	32

3.3	Analyse reformulée de la convergence du développement	38
3.3.1	Réécriture des $A^{(k)}(S)$ en termes des $X^{(k)}(S)$	38
3.3.2	Estimation de $X^{(k)}(0)$	42
3.3.3	La matrice C^p	46
3.4	En résumé	52
CHAPITRE 4 : CAS CONCRET DU <i>SPIN</i>-1/2 DANS UN CHAMP		
MAGNÉTIQUE		53
4.1	Présentation du système : un rappel	53
4.2	Calcul des $A^{(k)}(S)$	54
4.3	Vérification à partir de l'état exact	57
4.4	Un point délicat	63
CONCLUSION		66
BIBLIOGRAPHIE		ix

LISTE DES FIGURES

1.1	Illustration de l'approximation adiabatique.	5
1.2	Champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe. . . .	12
1.3	Direction du champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe dans le système b	17
4.1	Champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe : un rappel.	54

REMERCIEMENTS

J'aimerais tout d'abord remercier mon directeur de recherche, Richard MacKenzie, pour la générosité de son temps et pour ses patientes et répétées explications sans lesquelles ce mémoire n'aurait pu voir le jour.

Je voudrais également remercier mes collègues de bureau, les "*bananes théoriques volantes*" : Sam, Vincent, Hélène, Phil, Pierre-Luc et Martin pour ces deux dernières années passées avec vous. Merci d'avoir été là autant durant les "hauts" que les "bas". Merci spécialement à Hélène avec qui j'ai travaillé étroitement durant les quelques derniers mois.

Merci à Mathieu pour son aide "technique" et merci à Alex et Paulo pour leur "sens de la perspective"...

Je tiens finalement à remercier mes parents, Lucie et Jogues pour leur soutien moral et financier. Merci à mes frères, amis et "colocs" pour les moments de divertissement et de folie tant nécessaires au travail soutenu.

Merci à tous !

INTRODUCTION

En mécanique quantique, la dynamique des systèmes fermés est gouvernée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H}(t) |\psi\rangle \quad (1)$$

où $\hat{H}(t)$ est le Hamiltonien du système et $|\psi\rangle$, vecteur dans un espace de Hilbert, représente l'état quantique du système. La résolution de cette équation nous donne l'état du système $|\psi(t)\rangle$, l'objet d'intérêt en mécanique quantique qui nous sert à prédire les résultats possibles lors d'une mesure (au temps t) d'une observable ainsi que les probabilités relatives associées à ces résultats. Dans un contexte général, le Hamiltonien $\hat{H}(t)$ est un opérateur qui peut dépendre du temps t , et l'équation de Schrödinger peut s'avérer très difficile à résoudre. En fait, avec un Hamiltonien qui dépend du temps, il existe très peu de systèmes réels pour lesquels on peut résoudre exactement l'équation. Par contre, dans certains cas, on peut utiliser des méthodes d'approximation pour trouver l'état $|\psi(t)\rangle$. Deux d'entre elles sont la théorie des perturbations et l'approximation soudaine (lors d'un changement brusque du Hamiltonien, sur une courte durée). Ce mémoire, quant à lui, porte sur une autre de ces méthodes : *l'approximation adiabatique*.

Dans certains cas (i.e. pour certains systèmes), on peut utiliser l'approximation adiabatique afin d'estimer l'état quantique du système : $|\psi(t)\rangle$. L'expression "dans certains cas" sous-entend qu'il existe un critère pour discriminer les systèmes pour lesquels on peut utiliser l'approximation adiabatique des autres systèmes pour lesquels on ne peut pas. Au premier chapitre de ce mémoire, nous présenterons un portrait de l'approximation adiabatique et nous commenterons une récente controverse sur le critère "standard" supposé nous indiquer si on peut utiliser l'approximation adiabatique pour approximer l'équation de Schrödinger.

Le reste du mémoire constitue une étude sur les conditions de validité de l'approximation adiabatique. Plus précisément, notre analyse sera faite en considérant

de façon indépendante l'effet (sur la validité de l'approximation adiabatique) de la durée de l'intervalle de temps sur lequel on considère le système. Pour ce faire nous procéderons comme suit :

Au chapitre 2, nous présenterons un développement qui constitue une nouvelle façon d'écrire l'état quantique $|\psi(t)\rangle$ d'un système. Il s'avère que ce nouveau développement constitue un outil très utile pour étudier les conditions de validité de l'approximation adiabatique.

En effet, au chapitre 3, nous étudierons les conditions sous lesquelles le développement présenté au chapitre 2 converge. Cette étude de convergence nous permettra du même coup d'observer les conditions de validité de l'approximation adiabatique et, entre autres, le rôle joué par la durée de l'intervalle de temps considéré dans cette histoire.

Nous finirons, au chapitre 4, par vérifier nos conclusions en étudiant un système concret pour lequel on peut résoudre exactement l'équation de Schrödinger : un objet de $spin-1/2$ plongé dans un champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe.

CHAPITRE 1

DU THÉORÈME ADIABATIQUE À L'APPROXIMATION ADIABATIQUE

L'approximation adiabatique est basée sur une propriété des systèmes quantiques nommée à toutes fins pratiques : *le théorème adiabatique*. Le théorème adiabatique est parfois attribué à Paul Ehrenfest, mais la première preuve du théorème dans le cadre de la mécanique quantique moderne fut donnée par Max Born et Vladimir Fock en 1928 [1]. Qualitativement, ce théorème stipule que : *pour un système fermé dont le Hamiltonien varie infiniment lentement ("varie infiniment lentement" devra être précisé quantitativement), l'évolution de l'état du système dans le temps préserve les sous-espaces spectraux associés à chaque valeur propre du Hamiltonien*. Autrement dit, un état du système appartenant initialement (à $t = 0$) à un sous-espace spectral associé à une certaine valeur propre du Hamiltonien évoluera vers un état appartenant au sous-espace correspondant au temps t .

Mathématiquement, le théorème s'exprime comme suit.¹ Considérons un système décrit par un Hamiltonien $\hat{H}(t)$ variant infiniment lentement. Cette condition peut s'écrire comme ceci. Soit $\tilde{H}(s)$, un Hamiltonien sans dimension, fonction d'un paramètre sans dimension s . Cet Hamiltonien sans dimension est relié au Hamiltonien du système de la façon suivante :

$$\hat{H}(t) = E\tilde{H}(t/T) \tag{1.1}$$

où E est une constante non nulle ayant des dimensions d'énergie et T un paramètre ayant des unités de temps. (Notons les "chapeaux" et les tildes qui différencient les fonctions.) Ici, le paramètre T est relié à l'échelle de temps sur laquelle l'opérateur change ou, autrement dit, à la "vitesse" avec laquelle l'opérateur $\hat{H}(t)$ change dans

¹Nous suivons l'argument de A. Messiah ici [2].

le temps. En prenant la limite $T \rightarrow \infty$, on arrive à représenter un Hamiltonien $\hat{H}(t)$ variant "infiniment lentement".

Maintenant, voici $E_1(t), E_2(t), \dots, E_j(t), \dots$, l'ensemble des valeurs propres instantanées (au temps t) du Hamiltonien du système $\hat{H}(t)$ et $\hat{P}_1(t), \hat{P}_2(t), \dots, \hat{P}_j(t), \dots$, les projecteurs vers les sous-espaces associés. (Quoi que pas nécessaire, nous faisons ici l'hypothèse d'un spectre discret pour simplifier.) À ces quantités, on peut associer respectivement les quantités sans dimension $\epsilon_1(t/T), \epsilon_2(t/T), \dots, \epsilon_j(t/T), \dots$, et $\tilde{P}_1(t/T), \tilde{P}_2(t/T), \dots, \tilde{P}_j(t/T), \dots$, où $\epsilon_j(t/T) = E_j(t)/E$. Si on peut faire les deux hypothèses suivantes :

- 1) les valeurs propres $\epsilon_j(s)$ demeurent distinctes sur tout l'intervalle et,
- 2) les dérivées $d\tilde{P}_j(s)/ds$ et $d^2\tilde{P}_j(s)/ds^2$ existent et sont continues sur l'intervalle, alors, le théorème adiabatique s'exprime comme suit² :

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{U}(t/T) \tilde{P}_j(0) = \tilde{P}_j(t/T) \lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{U}(t/T). \quad (1.2)$$

où $\tilde{U}(t/T)$ est l'opérateur d'évolution associé au Hamiltonien sans dimension $\tilde{H}(t/T)$.

Donc, si le système est initialement dans un état propre $|0(0)\rangle$ (qui n'est pas nécessairement l'état fondamental) d'un tel Hamiltonien, associé à la valeur propre $E_0(0)$, le théorème adiabatique nous indique qu'il évoluera au temps t vers l'état $|0(t)\rangle$ associé à la valeur propre $E_0(t)$ qui se déduisent par continuité à partir de $|0(0)\rangle$ et $E_0(0)$. On peut dire que $|0(t)\rangle$ et $E_0(t)$ sont les homologues de $|0(0)\rangle$ et $E_0(0)$ par rapport au spectre.

²Une preuve rigoureuse de ceci se trouve dans [2].

1.1 Vers l'approximation adiabatique

Quoique très puissant, le théorème adiabatique en tant que tel est très peu utile car aucun système réel ne varie infiniment lentement. Par contre, si le Hamiltonien du système varie *suffisamment lentement*, il est possible d'approximer l'évolution de l'état dans le sens du théorème adiabatique : c'est l'approximation adiabatique (voir la figure 1.1).

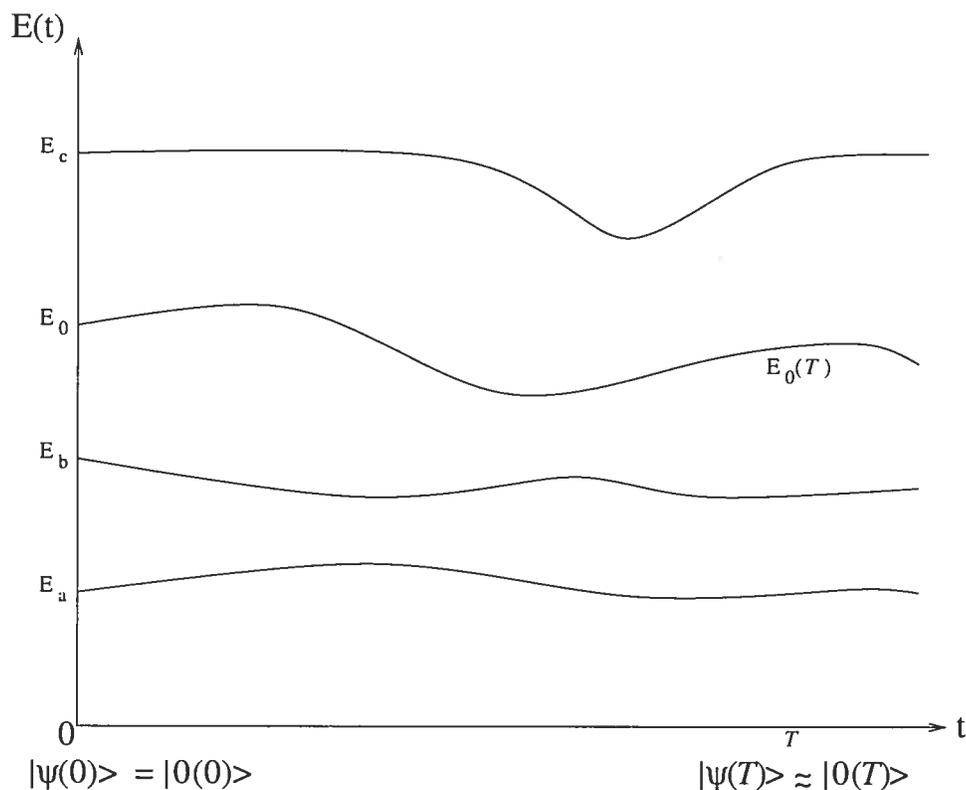


FIG. 1.1 – Illustration de l'approximation adiabatique. Si on commence dans un état initial $|\psi(0)\rangle = |0(0)\rangle$ associé à l'énergie $E_0(0)$ et que le Hamiltonien du système varie *suffisamment lentement*, alors l'état du système évoluera (à une phase près) au temps T vers l'état $|\psi(T)\rangle \approx |0(T)\rangle$ associé à l'énergie $E_0(T)$ qui se déduit de $E_0(0)$ par continuité.

On peut considérer l'approximation adiabatique de la façon suivante. Exprimons

l'état d'un système au temps t comme³ :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t) e^{-i \int_0^t dt' E_m(t')} |m(t)\rangle \quad (1.3)$$

où $|m(t)\rangle$ sont les états propres orthonormés du Hamiltonien $\hat{H}(t)$, $E_m(t)$ les valeurs propres et $a_m(t)$ des coefficients à déterminer. Pour simplifier les explications, nous ferons l'hypothèse d'un spectre discret et non-dégénéré. On considère également un Hamiltonien qui évolue très lentement afin de se placer dans le contexte d'une *évolution adiabatique*. Physiquement, on considère comme évoluant lentement les systèmes pour lesquels le temps caractéristique de changement du Hamiltonien dans le temps est beaucoup plus grand que l'inverse de la fréquence de Bohr entre deux niveaux. Une façon de comprendre ceci est qu'un Hamiltonien ayant, par exemple, une fréquence de changement comparable à la fréquence de Bohr entre deux niveaux pourrait engendrer une résonance quant à la probabilité de transition entre ces deux niveaux. (On peut penser à ceci en termes de théorie des perturbations.)

On peut maintenant utiliser la liberté dans le choix de la phase des états propres pour imposer :

$$\langle m(t) | \dot{m}(t) \rangle = 0 \quad \forall m, t \quad (1.4)$$

où $|\dot{m}(t)\rangle \equiv \frac{d}{dt} |m(t)\rangle$. Si ensuite on insère l'état $|\psi(t)\rangle$ dans l'équation de Schrödinger et qu'on frappe des deux côtés avec $\langle n(t) |$, on trouve :

$$\dot{a}_n(t) = - \sum_{m \neq n} a_m(t) \langle n(t) | \dot{m}(t) \rangle e^{-i \int_0^t dt' (E_m(t') - E_n(t'))} \quad (1.5)$$

qu'on peut intégrer de 0 à t pour obtenir :

$$a_n(t) = a_n(0) - \sum_{m \neq n} \int_0^t dt' a_m(t') \langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle e^{-i \int_0^{t'} dt'' (E_m(t'') - E_n(t''))}. \quad (1.6)$$

Si on était initialement (à $t = 0$) dans un état propre du Hamiltonien, disons $|0(0)\rangle$

³Pour le reste de ce mémoire, nous travaillerons avec les unités naturelles $\hbar = 1$.

(qui n'est pas nécessairement l'état fondamental), alors $a_m(0) = \delta_{m0}$ (où δ est le delta de Kronecker) et on obtient :

$$a_n(t) = \delta_{n0} - \sum_{m \neq n} \int_0^t dt' a_m(t') \langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle e^{-i \int_0^{t'} dt'' (E_m(t'') - E_n(t''))}. \quad (1.7)$$

Cette équation intégrale n'est évidemment pas satisfaisante car on a $a_n(t)$ en fonction des $a_m(t)$ qu'on ne connaît pas et qu'on essaie justement de résoudre. Par contre, il existe une façon d'approximer $a_n(t)$. Il s'agit d'obtenir une solution itérative en remplaçant les $a_m(t)$ dans (1.7) par la forme obtenue pour $a_n(t)$ dans cette même équation et de recommencer le processus. On peut obtenir la solution ordre par ordre :

$$\begin{aligned} a_n^{(0)}(t) &= \delta_{n0} \\ a_n^{(1)}(t) &= - \int_0^t dt' \langle n(t') | \dot{0}(t') \rangle e^{-i \int_0^{t'} dt'' (E_0(t'') - E_n(t''))} \\ a_n^{(2)}(t) &= - \sum_{m \neq n} \int_0^t dt' a_m^{(1)}(t') \langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle e^{-i \int_0^{t'} dt'' (E_m(t'') - E_n(t''))} \\ &\dots \end{aligned} \quad (1.8)$$

Qualitativement, si les termes deviennent de plus en plus petits, on aura un développement perturbatif et on pourra calculer notre solution jusqu'à l'ordre désiré et couper le reste de la série. Pour un Hamiltonien qui évolue très lentement, on s'attend intuitivement à ce que les états propres $|m(t)\rangle$ changent très lentement et donc que $\langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle \ll 1$ pour $n \neq m$ (et pour toute la période de temps où l'on considère le système⁴). Ainsi, un terme d'ordre j contiendra j facteurs d'espèce $\langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle$ et on peut s'attendre à ce que, *grossièrement*, les termes deviennent de plus en plus petits et que la série converge. Plus précisément, si on regarde par exemple le terme de premier ordre pour $n \neq 0$, on voit qu'on peut le réécrire

⁴Cette question sera adressée plus en détails au chapitre 3.

comme :

$$a_n^{(1)}(t) = \int_0^t dt' \frac{\langle n(t') | \dot{0}(t') \rangle}{i(E_0(t') - E_n(t'))} \frac{d}{dt'} (e^{-i \int_0^{t'} dt'' (E_0(t'') - E_n(t''))}) \quad (1.9)$$

qu'on peut intégrer par parties pour obtenir :

$$a_n^{(1)}(t) = \left[F_{n0}(t') e^{-i \int_0^{t'} dt'' \omega_{0n}(t'')} \right]_0^t - \int_0^t dt' e^{-i \int_0^{t'} dt'' \omega_{0n}(t'')} \frac{d}{dt'} F_{n0}(t') \quad (1.10)$$

où $F_{n0}(t') = \left(\frac{\langle n(t') | \dot{0}(t') \rangle}{i(E_0(t') - E_n(t'))} \right)$ et $\omega_{0n}(t'') = E_0(t'') - E_n(t'')$. Si on pense à $F_{n0}(t')$ comme une fonction à peu près constante dans le temps ou, du moins, qui varie très lentement (et ce parce que $\hat{H}(t)$ varie très lentement), alors $\frac{d}{dt'} F_{n0}(t')$ est extrêmement petit ; et il est bien connu que pour une fonction complexe $g(t)$ continue sur son intervalle d'intégration $[a, b]$:

$$\left| \int_a^b dt g(t) \right| \leq \int_a^b dt |g(t)|. \quad (1.11)$$

Les états et valeurs propres étant continus par hypothèse et $E_0(t'') \neq E_n(t'')$, ($n \neq 0$), il s'ensuit que :

$$\begin{aligned} \left| \int_0^t dt' e^{-i \int_0^{t'} dt'' \omega_{0n}(t'')} \frac{d}{dt'} F_{n0}(t') \right| &\leq \int_0^t dt' \left| e^{-i \int_0^{t'} dt'' \omega_{0n}(t'')} \frac{d}{dt'} F_{n0}(t') \right| \\ &= \int_0^t dt' \left| \frac{d}{dt'} F_{n0}(t') \right|. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Si $F_{n0}(t')$ varie suffisamment lentement, le deuxième terme dans (1.10) sera négligeable par rapport au premier et on voit que $|a_n^{(1)}(t)| \sim O(|F|)$. Le terme de premier ordre sera négligeable si $|F_{n0}(t')| \ll 1$ et, de façon plus générale, les termes d'ordres supérieurs seront négligeables si :

$$|F_{nm}(t')| = \left| \frac{\langle n(t') | \dot{m}(t') \rangle}{E_m(t') - E_n(t')} \right| \ll 1 \quad \forall n, m, t'. \quad (1.13)$$

Dans de pareilles circonstances, on a une *évolution adiabatique* :

$$|\psi(t)\rangle \approx e^{-i \int_0^t dt' E_0(t')} |0(t)\rangle \quad \implies \quad |\langle 0(t) | \psi(t) \rangle| \approx 1, \quad (1.14)$$

qui est reconnue comme l'approximation adiabatique.

L'inégalité (1.13) est, quant à elle, reconnue comme étant le critère "standard" pour vérifier le *degré d'adiabaticité* ou, en d'autres mots, la *lenteur* de l'évolution du système; information capitale pour savoir si on peut utiliser l'approximation adiabatique pour estimer l'état du système étudié.

1.2 Précisions sur l'utilisation du critère

Il y a quelque temps, certaines personnes [9–11] ont travaillé sur ou commenté une "défectuosité" dans le critère (1.13) qui s'avère être, après analyse, une restriction quant à l'utilisation de cette expression comme critère pour vérifier le degré d'adiabaticité ou encore la lenteur du Hamiltonien du système. Voici l'argument de quelques-uns d'entre eux (D.M. Tong, K. Singh, L.C. Kwek & C.H. Oh, voir [11]) présenté dans un contexte général.

Tong *et al.* considèrent deux systèmes, a et b , décrits respectivement par les Hamiltoniens $\hat{H}^a(t)$ et $\hat{H}^b(t)$ qui sont reliés par la transformation :

$$\hat{H}^b(t) = -\hat{U}^{a\dagger}(t)\hat{H}^a(t)\hat{U}^a(t), \quad (1.15)$$

où $\hat{U}^a(t)$ est l'opérateur d'évolution du système a . On fait l'hypothèse que le système a respecte l'inégalité (1.13), équation à laquelle nous référerons maintenant comme étant le critère *a priori*. Les auteurs de [11] démontrent ensuite que si le système a respecte le critère *a priori*, alors, automatiquement, étant donné le lien qui les unit, le système b le respecte aussi.

Pour que le critère *a priori* soit adéquat, on doit avoir l'implication suivante. Pour un système décrit par $\hat{H}(t)$ et initialement dans $|0(0)\rangle$ qui est état propre de

$\hat{H}(0)$, alors :

$$\text{critère } a \text{ priori satisfait par le système} \implies |\langle 0(t) | \psi(t) \rangle| \approx 1. \quad (1.16)$$

pour un $t > 0$ (où $|\psi(t)\rangle$ est (comme toujours) l'état du système au temps t). Nous référerons au côté droit de (1.16) comme étant le critère *a posteriori* (qui est nul autre que l'approximation adiabatique). On donne le nom de critère *a priori* à l'inégalité (1.13) car cette inégalité se veut un critère pour déterminer si on peut utiliser l'approximation adiabatique (pour estimer l'état du système) dans une situation où l'on est incapable de résoudre l'équation de Schrödinger. Le côté droit de (1.16), quant à lui, est appelé le critère *a posteriori* car on ne peut le vérifier qu'**après** avoir résolu l'équation de Schrödinger. Bien entendu, si on peut résoudre l'équation de Schrödinger, l'approximation adiabatique devient inutile car on a dès lors accès à l'état exact. Par contre, dans cette analyse, il sera ultimement question de systèmes pour lesquels on peut résoudre l'équation de Schrödinger ; et donc, on pourra "vérifier" le critère *a posteriori* pour ces systèmes et la véracité de l'implication (1.16).

Or, pour en revenir à l'argument de Tong *et al.*, ils démontrent que si les critères *a priori* et *a posteriori* sont satisfaits par le système a , le système b , quant à lui, peut **ne pas** respecter le critère *a posteriori* malgré le fait qu'il respecte le critère *a priori*. En d'autres mots, le système b peut respecter le critère (1.13) mais ne pas évoluer de façon adiabatique (comme l'indique l'équation (1.16)).

Le fait le plus important à noter ici est que le critère (1.13) ne s'applique pas de façon pertinente à n'importe quel système. On ne peut pas appliquer le critère machinalement au système sous étude pour en déduire, si le critère est satisfait, qu'on peut utiliser l'approximation adiabatique pour estimer l'état du système. Lors de la dérivation du critère mathématique (1.13), le Hamiltonien du système était **déjà** considéré comme étant un Hamiltonien qui évolue *lentement*. Et cela s'avère être d'une grande importance dans la dérivation du critère.

Ce qui est important pour se placer dans l'esprit d'un système qui évolue len-

tement, c'est que le temps caractéristique de changement du Hamiltonien τ soit beaucoup plus grand que l'inverse de l'énergie caractéristique E du spectre (l'ordre de grandeur de l'énergie entre deux niveaux consécutifs du spectre). De cette façon, la variation du Hamiltonien ne pourra pas provoquer de résonance quant à la probabilité de transition entre deux niveaux, (on peut penser à ceci comme on le fait dans la théorie des perturbations dépendantes du temps). Dans ce cas, on a un système qui évolue lentement et un critère *à priori* respecté impliquera une évolution adiabatique.

Le point amené par Tong *et al.* est sans contredit une restriction importante quant à l'utilisation de (1.13) comme critère pour savoir si on peut utiliser l'approximation adiabatique. Mais voyons cela plus en détails en se plaçant dans le cadre d'une situation concrète. Cela nous permettra d'analyser ce qui se passe réellement.

1.3 Analyse d'un exemple concret

Voici le même argument placé dans le contexte d'un des rares systèmes réels dépendant du temps dont l'équation de Schrödinger se résout exactement : une particule de *spin*-1/2 plongée dans un champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe.

Le Hamiltonien d'un tel système s'écrit :

$$\hat{H}(t) = -\gamma \vec{S} \cdot \vec{B}(t) \quad (1.17)$$

où \vec{S} est le vecteur de spin, $\vec{B}(t)$ le champ magnétique et γ une constante (non-nulle) propre à la particule physique étudiée. Si la magnitude du champ magnétique est constante dans le temps (ce qui sera le cas dans cet exemple), alors $\vec{B}(t)$ s'écrit comme $\vec{B}(t) = B\vec{v}(t)$ où B est la grandeur du champ et $\vec{v}(t)$ un vecteur unitaire pointant dans la direction du champ. Avec ceci, le Hamiltonien devient :

$$\hat{H}(t) = -\frac{\omega_0}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{v}(t) \quad (1.18)$$

où $\omega_0 \equiv \gamma B$ est une constante qui s'avère être la fréquence de Bohr liée aux deux états propres du système et $\vec{\sigma}$ un vecteur contenant les matrices de Pauli. Comme tout juste mentionné, ce système possède (à un t donné) deux états propres de valeur propre $\pm \frac{\omega_0}{2}$ et qui correspondent physiquement au spin aligné et anti-aligné avec le champ magnétique.

Sans perdre de généralité, nous pouvons définir :

$$\vec{v}(t) = (\sin \theta \cos \omega t, \sin \theta \sin \omega t, \cos \theta) \quad (1.19)$$

qui correspond à un champ magnétique incliné d'un angle θ par rapport à \hat{z} et tournant à fréquence ω autour de l'axe \hat{z} . À $t = 0$, le champ magnétique est dans le plan xOz (voir la figure 1.2).

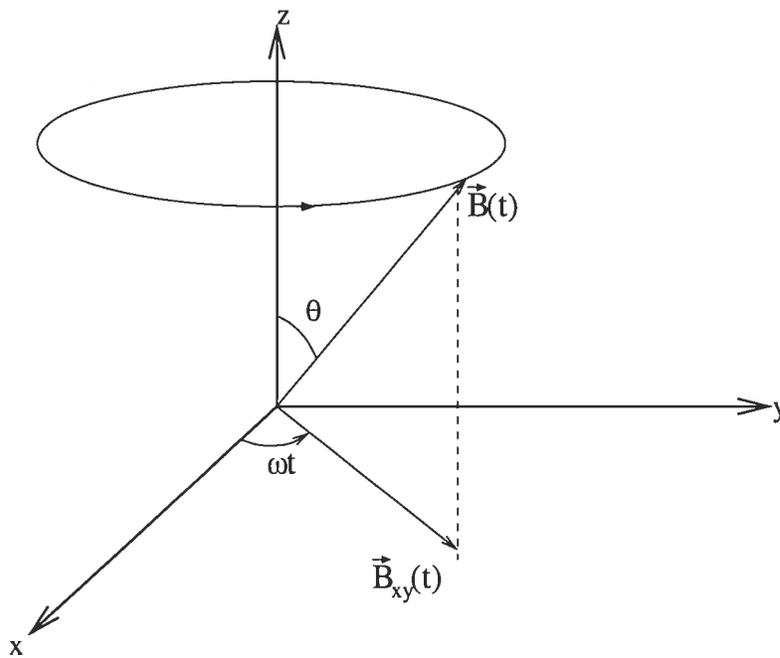


FIG. 1.2 – Champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe. Initialement, le champ magnétique est dans le plan xOy (pour $\theta \neq 0$).

Avec ceci, le Hamiltonien devient :

$$\hat{H}(t) = -\frac{\omega_0}{2} (\sigma_x \sin \theta \cos \omega t + \sigma_y \sin \theta \sin \omega t + \sigma_z \cos \theta). \quad (1.20)$$

On peut maintenant résoudre l'équation aux valeurs propres $\hat{H}(t) |\varphi(t)\rangle = E(t) |\varphi(t)\rangle$ pour trouver les états propres d'énergie au temps t . Dans la base naturelle de σ_z , $|\pm\rangle_z$, les états propres s'écrivent :

$$\begin{aligned} |-(t)\rangle &= e^{-i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle_z & \leftrightarrow & E_-(t) = -\frac{\omega_0}{2} \\ |+(t)\rangle &= -e^{-i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle_z & \leftrightarrow & E_+(t) = +\frac{\omega_0}{2} \end{aligned} \quad (1.21)$$

et on remarque que les énergies propres du système ne dépendent pas du temps.

On peut également, comme nous l'avons déjà dit, résoudre l'équation de Schrödinger pour trouver l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$ du système :

$$i \frac{d}{dt} \hat{U}(t) = \hat{H}(t) \hat{U}(t). \quad (1.22)$$

Pour ce faire, notons tout d'abord que, grâce aux relations de commutation des matrices de Pauli, $[\frac{\sigma_j}{2}, \frac{\sigma_k}{2}] = i \epsilon_{jkl} \frac{\sigma_l}{2}$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_x}{2} \cos \omega t + \frac{\sigma_y}{2} \sin \omega t &= e^{-i\frac{\omega t}{2} \sigma_z} \frac{\sigma_x}{2} e^{i\frac{\omega t}{2} \sigma_z} \\ \frac{\sigma_z}{2} \cos \theta + \frac{\sigma_x}{2} \sin \theta &= e^{-i\frac{\theta}{2} \sigma_y} \frac{\sigma_z}{2} e^{i\frac{\theta}{2} \sigma_y}. \end{aligned} \quad (1.23)$$

Ceci nous permet de réécrire le Hamiltonien comme :

$$\hat{H}(t) = -\omega_0 \left(e^{-i\frac{\omega t}{2} \sigma_z} e^{-i\frac{\theta}{2} \sigma_y} \right) \frac{\sigma_z}{2} \left(e^{i\frac{\theta}{2} \sigma_y} e^{i\frac{\omega t}{2} \sigma_z} \right). \quad (1.24)$$

En posant ensuite la forme $\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2} \sigma_z} \hat{W}(t)$ et en insérant dans (1.22), on arrive à une équation de Schrödinger pour $\hat{W}(t)$ avec l'équivalent d'un Hamiltonien

constant :

$$i \frac{d}{dt} \hat{W}(t) = - \underbrace{\left[(\omega_0 \cos \theta + \omega) \frac{\sigma_z}{2} + (\omega_0 \sin \theta) \frac{\sigma_x}{2} \right]}_{\hat{H}_{eq.} \text{ ind. du temps}} \hat{W}(t) \quad (1.25)$$

qu'on sait résoudre :

$$\hat{W}(t) = e^{i \frac{\varpi t}{2} [\sigma_z \cos \beta + \sigma_x \sin \beta]} \quad (1.26)$$

où $\varpi \cos \beta \equiv (\omega_0 \cos \theta + \omega)$, $\varpi \sin \beta \equiv \omega_0 \sin \theta$ et $\varpi \equiv \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_0\omega \cos \theta + \omega^2}$.

On obtient finalement l'opérateur d'évolution :

$$\hat{U}(t) = e^{-i \frac{\omega t}{2} \sigma_z} e^{i \frac{\varpi t}{2} [\sigma_z \cos \beta + \sigma_x \sin \beta]}, \quad (1.27)$$

et ceci termine la présentation générale de la situation.

Maintenant, revenons à l'argument de Tong *et al.* Nous considérerons donc deux systèmes, a et b ; et nous dénoterons d'un indice a les objets et quantités appartenant au système a et d'un indice b ceux qui appartiennent au système b . Le système a est décrit par le Hamiltonien $\hat{H}^a(t) = -\frac{\omega_a}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{v}^a(t)$ avec $\vec{v}^a(t) = (\sin \theta_a \cos \omega_a t, \sin \theta_a \sin \omega_a t, \cos \theta_a)$. L'opérateur d'évolution est, comme exprimé en (1.27) :

$$\hat{U}^a(t) = e^{-i \frac{\omega_a t}{2} \sigma_z} e^{i \frac{\varpi_a t}{2} [\sigma_z \cos \beta_a + \sigma_x \sin \beta_a]}. \quad (1.28)$$

Si on vérifie l'expression (1.13) pour le système a , on trouve :

$$\left| \frac{\langle +^a(t) | \dot{-}^a(t) \rangle}{E_-^a(t) - E_+^a(t)} \right| = \left| \frac{\langle -^a(t) | \dot{+}^a(t) \rangle}{E_+^a(t) - E_-^a(t)} \right| = \left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{2\omega_0} \right| \ll 1. \quad (1.29)$$

On peut donc prendre : $|(\omega_a/\omega_0) \sin \theta_a| \ll 1$ comme étant le critère *a priori*. Le critère *a posteriori* (côté droit de (1.16)) pour un état initial $|\psi^a(0)\rangle = |+^a(0)\rangle$ est

quant à lui :

$$|\langle +^a(t) | \psi^a(t) \rangle| = |\langle +^a(t) | \hat{U}^a(t) | +^a(0) \rangle| = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_a \sin \theta_a}{\varpi_a} \right)^2 \sin^2 \frac{\varpi_a t}{2}} \approx 1, \quad (1.30)$$

qui revient à : $\left| (\omega_a / \varpi_a) \sin \theta_a \sin \frac{\varpi_a t}{2} \right| \ll 1$ pour que le critère *a posteriori* soit satisfait. Maintenant, pour que le critère *a priori* soit adéquat, on voudrait que :

$$\left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{\omega_0} \right| \ll 1 \quad \Longrightarrow \quad \left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{\varpi_a} \sin \frac{\varpi_a t}{2} \right| \ll 1. \quad (1.31)$$

Pour que cette implication s'impose à un t quelconque, il faut que $|\varpi_a| \geq |\omega_0|$. Or, étant donné que $\varpi_a \equiv \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_0\omega_a \cos \theta_a + \omega_a^2}$, ceci n'est pas garanti. Effectivement, on peut prendre $\omega_0 > 0$ qui est l'échelle d'énergie du système et $0 \leq \theta_a \leq \frac{\pi}{2}$ (si ce n'est pas le cas, on peut réarranger notre système d'axes pour que ce soit le cas). Par contre, on **ne peut pas** exiger $\omega_a > 0$ si on veut rester dans un cas général. Autrement dit, on ne peut pas imposer une direction à la rotation du champ magnétique. Pourquoi cela ? On aurait tendance à penser qu'il n'y a pas d'importance à accorder au sens de rotation du champ magnétique. Surprenamment, le signe de ω_a a une importance pour la vérification de l'implication (1.31). Avec la définition de ϖ_a , il est clair que :

$$\omega_a \geq 0 \quad \Longrightarrow \quad \varpi_a \geq \omega_0, \quad (1.32)$$

et, donc, si $\varpi_a \geq \omega_0$, alors un système qui satisfait le critère *a priori* satisfera également le critère *a posteriori*. Par contre, si ω_a est négatif, alors il est possible que $\varpi_a < \omega_0$; et dans ces circonstances, il est possible que le critère *a priori* soit satisfait, mais **non** le critère *a posteriori*. Ce serait le cas par exemple si $\omega_a \approx -\omega_0$. Dans ce cas :

$$\varpi_a \approx \omega_0 \sqrt{2(1 - \cos \theta_a)}. \quad (1.33)$$

Et donc, pour certaines valeurs de θ_a , on a $\varpi_a < \omega_0$ et l'implication (1.31) n'est pas nécessairement respectée. Nous reviendrons sur ce point un peu plus loin.

Examinons maintenant le système b . Étant donné le lien entre $\hat{H}^a(t)$ et $\hat{H}^b(t)$ les deux matrices auront les mêmes valeurs propres :

$$\begin{aligned}
 \det(\hat{H}^b(t) - \lambda) &= \det(-\hat{U}^{a\dagger}(t)\hat{H}^a(t)\hat{U}^a(t) - \lambda) \\
 \det(\hat{H}^b(t) - \lambda) &= \det(\hat{U}^{a\dagger}(t)(-\hat{H}^a(t) - \lambda)\hat{U}^a(t)) \\
 &= \det(\hat{U}^a(t)\hat{U}^{a\dagger}(t)(-\hat{H}^a(t) - \lambda)) \\
 &= \det(-\hat{H}^a(t) - \lambda).
 \end{aligned} \tag{1.34}$$

On sait que pour une matrice diagonalisable M , il existe une matrice inversible P et une matrice diagonale D telles que $P^{-1}MP = D$ où les éléments diagonaux de D sont les valeurs propres de M . Donc, les valeurs propres de $\hat{H}^b(t)$ seront celles de $\hat{H}^a(t)$, mais avec un signe opposé. Mais comme les valeurs propres de $\hat{H}^a(t)$ sont $\pm \frac{\omega_0}{2}$, on en conclut que $\hat{H}^b(t)$ a les mêmes valeurs propres.

Également, étant donné la forme de $\hat{U}^a(t)$ en (1.28) et celle de $\hat{H}^a(t)$ en (1.24), alors :

$$\begin{aligned}
 \hat{H}^b(t) &= -\hat{U}^{a\dagger}(t)\hat{H}^a(t)\hat{U}^a(t) \\
 &= \frac{-\omega_0}{2} \left(e^{-i\frac{\varpi_a t}{2}[\sigma_z \cos \beta_a + \sigma_x \sin \beta_a]} e^{-i\frac{\theta_a}{2}\sigma_y} \right) (-\sigma_z) \left(e^{i\frac{\theta_a}{2}\sigma_y} e^{i\frac{\varpi_a t}{2}[\sigma_z \cos \beta_a + \sigma_x \sin \beta_a]} \right).
 \end{aligned} \tag{1.35}$$

De la forme de $\hat{H}^b(t)$ en (1.35), on déduit qu'on peut également l'écrire comme :

$$\hat{H}^b(t) = -\frac{\omega_0}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{v}^b(t) \tag{1.36}$$

où le vecteur $\vec{v}^b(t)$ est le vecteur $-\hat{z}$ sur lequel on a effectué d'abord une rotation d'un angle θ_a autour de l'axe y puis une rotation d'un angle $\varpi_a t$ autour de l'axe $\hat{u} = (\cos \beta_a) \hat{z} + (\sin \beta_a) \hat{x}$. Donc, dans le système b , l'angle d'inclinaison du champ par rapport à l'axe de rotation est :

$$\begin{aligned}
 \theta_b &= \arccos \left[\underbrace{((\cos \beta_a) \hat{z} + (\sin \beta_a) \hat{x})}_{\hat{u}} \cdot \underbrace{(-(\cos \theta_a) \hat{z} - (\sin \theta_a) \hat{x})}_{\vec{v}^b(0)} \right] \\
 &= \arccos[\cos(-\beta_a + \theta_a)] = \theta_a - \beta_a
 \end{aligned} \tag{1.37}$$

et la fréquence de rotation du champ magnétique est $\omega_b = -\varpi_a$ (le signe négatif vient du fait qu'on veut $0 \leq \theta_b \leq \frac{\pi}{2}$; voir la figure 1.3).

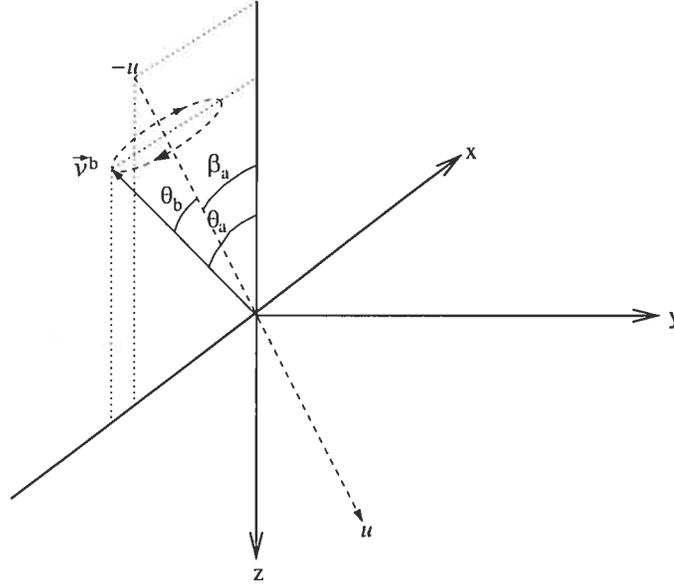


FIG. 1.3 – Direction du champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe dans le système b . Le vecteur $\vec{v}^b(t)$ tourne autour de l'axe $-u$ (qui est dans le plan xOz) avec une fréquence négative. On a effectué une rotation du système d'axes de π autour de l'axe y pour faciliter la visualisation de la situation.

La grande similarité entre les deux systèmes nous permet de deviner tout de suite les expressions des critères *a priori* et *a posteriori* pour le système b . Après tout, ces quantités ne devraient pas dépendre du système d'axes utilisé et les expressions devraient ressembler à celles du système a . De (1.29) et (1.30), on déduit que les expressions pour les critères *a priori* et *a posteriori* du système b sont respectivement :

$$\left| \frac{\omega_b \sin \theta_b}{\omega_0} \right| \ll 1 \quad \text{et} \quad \left| \frac{\omega_b \sin \theta_b}{\varpi_b} \sin \frac{\varpi_b t}{2} \right| \ll 1. \quad (1.38)$$

Si, afin de faire maintenant le lien entre les critères des deux systèmes, on réécrit les expressions (1.38) en termes des quantités appartenant au système a , on obtient

pour le critère *à priori* :

$$\left| \frac{\varpi_a \sin(\theta_a - \beta_a)}{\omega_0} \right| = \left| \frac{\varpi_a (\sin \beta_a \cos \theta_a - \sin \theta_a \cos \beta_a)}{\omega_0} \right| \quad (1.39)$$

$$= \left| \frac{\omega_a \sin \theta_a}{\omega_0} \right| \ll 1, \quad (1.40)$$

qui est la même expression que pour le système *a*. Donc, comme dit dans la présentation de l'argument dans un cadre général à la section précédente, si le système *a* satisfait le critère *a priori*, alors, automatiquement, le système *b* le satisfait aussi.

Maintenant, on veut réécrire l'expression du critère *a posteriori* pour le système *b* en termes des quantités du système *a*. Si on développe ϖ_b , on s'aperçoit que $\varpi_b = \omega_a$. Avec ceci, le critère *a posteriori* du système *b* devient :

$$|\sin \theta_a| \ll 1. \quad (1.41)$$

En observant les expressions pour les critères des deux systèmes, on s'aperçoit que si $\omega_a \ll \omega_0$ et $\sin \theta_a \sim 1$, alors le système *a* respecte les critères *a priori* et *a posteriori*; mais le système *b*, quant à lui, respecte le critère *a priori*, mais **non** le critère *a posteriori* (comme présenté à la section précédente). Ceci laisse donc croire qu'un critère *a priori* respecté ne garantit pas une évolution adiabatique du système. En fait, la démonstration de ceci par l'argument de Tong *et al.* est assez marquante! Par contre, il faut se rappeler que, quand nous avons dérivé le critère *a priori* (voir (1.13)), nous nous étions **déjà** placés dans le cadre d'un système qui évolue lentement dans le temps. Intuitivement, on peut penser à un système qui évolue lentement comme un système pour lequel l'échelle de temps caractéristique de changement du Hamiltonien dans le temps τ est beaucoup plus grande que l'inverse de l'échelle d'énergie caractéristique E . Voyons ce qui en est pour nos deux systèmes sous les conditions délicates $\omega_a \ll \omega_0$ et $\sin \theta_a \sim 1$.

On peut prendre comme échelle de temps caractéristique de changement dans

le temps des Hamiltoniens $\hat{H}^a(t)$ et $\hat{H}^b(t)$ l'inverse des fréquences de rotations des champs magnétiques, soient $\tau_a = 1/\omega_a$ et $\tau_b = 1/\omega_b$ respectivement. L'échelle d'énergie caractéristique E étant évidemment ω_0 pour les deux systèmes. Sous les conditions $\omega_a \ll \omega_0$ et $\sin \theta_a \sim 1$, on a donc $1/\omega_0 \ll 1/\omega_a$ et $\varpi_a \approx \omega_0$ pour le système a ; qui respecte bien notre idée d'un système qui évolue lentement dans le temps. D'ailleurs, le système a respecte les critères *a priori* et *a posteriori*.

Pour le système b , on se rappelle d'abord l'expression de son angle d'inclinaison : $\theta_b = \theta_a - \beta_a$ avec $\beta_a = \arcsin(\frac{\omega_0}{\varpi_a} \sin \theta_a)$. Si $\omega_a \ll \omega_0$, étant donné la définition de ϖ_a , ($\varpi_a \equiv \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_0\omega_a \cos \theta_a + \omega_a^2}$), alors on a $\varpi_a \approx \omega_0$. Dans ce cas, $\beta_a \approx \theta_a$ et on en déduit que $\theta_b \ll 1$ (voir la figure 1.3). Ceci veut dire que le champ magnétique dans le système b est très très près de son axe de rotation. De plus, étant donné que $\omega_b = -\varpi_a$, et que, sous $\omega_a \ll \omega_0$, on a $\varpi_a \approx \omega_0$, alors $\omega_b \approx -\omega_0$. L'échelle de temps $|\tau_b|$ est de l'ordre de grandeur de l'énergie caractéristique ω_0 et donc, le système b ne respecte **pas** notre idée intuitive d'un système qui évolue lentement ! En fait, le système b n'évolue pas lentement (car $|\omega_b| \sim \omega_0$), mais il change très peu de façon absolue (car $\theta_b \ll 1$).

L'expression du critère *a priori* pour le système b est la suivante :

$$\left| \frac{\omega_b \sin \theta_b}{\omega_0} \right| \ll 1, \quad (1.42)$$

que nous nous permettrons de réécrire ici comme :

$$\left| \underbrace{\left(\frac{1}{E\tau_b} \right)}_{\frac{\omega_b}{\omega_0}} \cdot \underbrace{\text{variation absolue de } \hat{H}^b(t)}_{\sin \theta_b} \right| \ll 1. \quad (1.43)$$

Qu'est-ce que cela nous dit ? En fait, c'est que le critère *a priori* : $\left| \frac{\langle n(t') | \hat{H}^b(t') \rangle}{E_m(t') - E_n(t')} \right| \ll 1$, contient une partie qui est influencée par la variation absolue du Hamiltonien ; ce qui n'a rien à voir avec la "vitesse" de son évolution dans le temps. Autrement dit, le critère *a priori* ne discrimine pas les systèmes évoluant lentement des systèmes

variant rapidement, mais peu de façon absolue. Dans le cas du système b , $E\tau_b \sim 1$, mais le Hamiltonien $\hat{H}^b(t)$ ne variant que très peu de façon absolue ($\theta_b \ll 1$) fait en sorte que le critère *a priori* est satisfait.

Il faudrait donc s'assurer que le système qu'on étudie respecte bel et bien l'idée d'une évolution *lente* :

$$\left| \left(\frac{1}{E\tau} \right) \right| \ll 1 \quad (1.44)$$

avant d'utiliser le critère *a priori*.

1.4 En terminant le portrait de l'approximation adiabatique

En terminant, il n'est pas impertinent de noter que la plupart de la littérature portant sur l'approximation adiabatique ne fait pas de différence explicite entre théorème adiabatique et approximation adiabatique et on utilise l'un ou l'autre des deux termes (l'approximation adiabatique découlant directement du théorème adiabatique comme nous l'avons vu).

Le théorème adiabatique (ou l'approximation adiabatique) a de nombreuses applications en physique. Les plus fameuses sont la transition de Landau-Zener, liée à la théorie des croisements de niveaux d'énergie dans les molécules ("*theory of energy levels crossings*") [12], le théorème de Gell-Mann–Low en théorie quantique des champs [13] ainsi que la phase de Berry [14].

Plus récemment, un nouveau paradigme de calcul quantique (effectué par un ordinateur quantique) basé directement sur l'approximation adiabatique a été proposé [15]. Comme ce domaine est en pleine effervescence ; l'intérêt pour l'approximation adiabatique a explosé de nouveau.

CHAPITRE 2

UN NOUVEAU DÉVELOPPEMENT PERTURBATIF POUR ÉTUDE L'APPROXIMATION ADIABATIQUE

Il y a quelque temps (hiver 2006), R. MacKenzie, H. Paquette et E. Marcotte [16] ont développé une nouvelle façon d'exprimer l'état quantique d'un objet sous l'influence d'un Hamiltonien $\hat{H}(t)$ qui dépend du temps ; et ce développement s'avère être très utile pour étudier l'approximation adiabatique. Une dérivation de ce développement est présentée ici.¹

2.1 Présentation du développement

On considère encore ici un système décrit par un Hamiltonien $\hat{H}(t)$ ayant des états propres instantanés $|n(t)\rangle$ et des valeurs propres $E_n(t)$. Comme au chapitre précédent, nous nous concentrerons sur des systèmes ayant un spectre discret et non-dégénéré en tout temps. Également, nous utiliserons la liberté dans le choix de la phase des états propres pour imposer :

$$\langle n(t) | \dot{n}(t) \rangle = 0 \quad \forall n, t. \quad (2.1)$$

On commence dans un état initial $|\psi(0)\rangle = |0(0)\rangle$ qui est état propre d'énergie, mais qui n'est pas nécessairement l'état fondamental du spectre. L'état à un temps T ultérieur est donc : $|\psi(T)\rangle = \hat{U}(T) |0(0)\rangle$ où $\hat{U}(T)$ est l'opérateur d'évolution dans le temps du système qu'on trouve en résolvant l'équation de Schrödinger :

$$\hat{U}(T) = \hat{T} \exp \left(-i \int_0^T dt \hat{H}(t) \right) \quad (2.2)$$

où \hat{T} est l'opérateur d'ordre dans le temps. La première étape de la dérivation du développement perturbatif est de discrétiser l'intervalle de temps $[0, T]$ en le

¹Nous suivrons l'argument original [16].

divisant en N intervalles de temps $\epsilon = T/N$. Nous définissons ensuite : $t_j = j\epsilon$ qui correspond au temps du commencement du j -ième intervalle. Par définition de $\hat{U}(t)$, on peut écrire :

$$\hat{U}(T) = \hat{U}_N \hat{U}_{N-1} \cdots \hat{U}_2 \hat{U}_1 \quad (2.3)$$

où \hat{U}_k est l'opérateur d'évolution entre les temps t_{k-1} et t_k :

$$\hat{U}_k = \hat{T} \exp \left(-i \int_{t_{k-1}}^{t_k} dt \hat{H}(t) \right). \quad (2.4)$$

Après un temps t_1 , on a l'état :

$$\begin{aligned} |\psi(t_1)\rangle &= \hat{U}_1 |0(0)\rangle \\ &= \sum_m |m(t_1)\rangle \langle m(t_1)| \hat{U}_1 |0(0)\rangle \\ &= \sum_m |m(t_1)\rangle (\hat{U}_1)_{m0} \end{aligned} \quad (2.5)$$

où $|m(t_1)\rangle$ sont les états propres du Hamiltonien au temps t_1 et :

$$(\hat{U}_1)_{m0} = \langle m(t_1)| \hat{T} \exp \left(-i \int_0^{t_1} dt \hat{H}(t) \right) |0(0)\rangle. \quad (2.6)$$

Nous ferons maintenant quelques approximations pour évaluer $(\hat{U}_1)_{m0}$ (qui deviendront des expressions exactes dans une certaine limite). Premièrement, nous écrivons le Hamiltonien comme :

$$\hat{H}(t) = \sum_n E_n(t) \hat{P}_n(t) = \sum_n E_n(t) |n(t)\rangle \langle n(t)|. \quad (2.7)$$

Dans la limite $N \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ avec T fixe, on peut faire des développements de Taylor autour de $t = 0$ pour nos objets et les tronquer :

$$\begin{aligned} |n(t)\rangle &= |n(0)\rangle + t |\dot{n}(0)\rangle + \cdots \\ E_n(t) &= E_n(0) + t \dot{E}_n(0) + \cdots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle n(t) | &= \langle n(0) | + t \langle \dot{n}(0) | + \dots \\
\langle m(t_1) | &= \langle m(0) | + t_1 \langle \dot{m}(0) | + \dots
\end{aligned} \tag{2.8}$$

On obtient ainsi pour \hat{U}_1 , au premier ordre en ϵ :

$$\begin{aligned}
\hat{U}_1 &\approx 1 - i \int_0^\epsilon dt \hat{H}(t) + O(\epsilon^2) \\
&\approx 1 - i\epsilon \sum_n |n(0)\rangle E_n(0) \langle n(0)| + O(\epsilon^2).
\end{aligned} \tag{2.9}$$

On peut enfin calculer notre élément de matrice jusqu'au premier ordre en utilisant (2.7), (2.8) et (2.9) dans (2.6) :

$$(\hat{U}_1)_{m0} \approx e^{-i\epsilon E_m(0)} \delta_{m0} + \epsilon \langle \dot{m}(0) | 0(0) \rangle + O(\epsilon^2). \tag{2.10}$$

Avec ceci, on obtient enfin l'état au temps t_1 :

$$|\psi(t_1)\rangle = e^{-i\epsilon E_0(0)} |0(t_1)\rangle + \epsilon \sum_{m \neq 0} \langle \dot{m}(0) | 0(0) \rangle |m(t_1)\rangle + O(\epsilon^2). \tag{2.11}$$

À l'ordre zéro, on a l'état $|0(t_1)\rangle$ (qui se déduit par continuité à partir de $|0(0)\rangle$), avec une phase dynamique. Au premier ordre, l'état est une combinaison linéaire d'états qui appartiennent au sous-espace spectral complémentaire à celui dans lequel est $|0(t_1)\rangle$. La prochaine étape est de recommencer le processus pour chaque intervalle de temps, remplaçant $\hat{U}_1 \rightarrow \hat{U}_k$ et $t_1 \rightarrow t_k$. On obtient finalement l'état après un temps T :

$$\begin{aligned}
|\psi(T)\rangle &= \sum_{m_N} \dots \sum_{m_2} \sum_{m_1} |m_N(T)\rangle \\
&\quad \cdot \prod_{j=0}^{N-1} \left(\delta_{m_{j+1}, m_j} e^{-i\epsilon E_{m_j}(t_j)} + \epsilon \langle \dot{m}_{j+1}(t_j) | m_j(t_j) \rangle + O(\epsilon^2) \right).
\end{aligned} \tag{2.12}$$

À l'ordre zéro (à l'ordre ϵ^0), on a une somme de produits de fonctions delta et d'exponentielles imaginaires :

$$|\psi(T)\rangle^{(0)} = \sum_{m_N} \cdots \sum_{m_2} \sum_{m_1} |m_N(T)\rangle \prod_{j=0}^{N-1} \delta_{m_{j+1}, m_j} e^{-i\epsilon E_{m_j}(t_j)}. \quad (2.13)$$

Dans la limite où $N \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ avec T fixe, ce terme devient :

$$|\psi(T)\rangle^{(0)} = e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} |0(T)\rangle, \quad (2.14)$$

où le "(0)" sur le ket indique que c'est la contribution à l'ordre zéro. À cet ordre, on a l'état $|0(T)\rangle$ qui se déduit par continuité à partir de $|0(0)\rangle$, multiplié par le facteur de phase dynamique. C'est le terme d'évolution adiabatique typique. S'il n'y avait **que** ce terme, on dirait que : *l'état a évolué de façon adiabatique sur la période de temps considérée*. Par contre, ici, on doit tenir compte des termes aux autres ordres.

Au premier ordre ($\sim \epsilon^1$), on prend $N - 1$ fonctions delta dans le produit (équation (2.12)) et un terme de forme $\epsilon \langle \dot{m}_{j+1}(t_j) | m_j(t_j) \rangle$:

$$|\psi(T)\rangle^{(1)} = \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{m_N} \cdots \sum_{m_2} \sum_{m_1} |m_N(T)\rangle \left(\prod_{j \neq k} \delta_{m_{j+1}, m_j} e^{-i\epsilon E_{m_j}(t_j)} \right) \epsilon \langle \dot{m}_{k+1}(t_k) | m_k(t_k) \rangle. \quad (2.15)$$

Dans la limite où $N \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ avec T fixe, ce terme devient :

$$|\psi(T)\rangle^{(1)} = \sum_{m \neq 0} |m(T)\rangle \int_0^T dt_1 e^{-i \int_{t_1}^T dt E_m(t)} \langle \dot{m}(t_1) | 0(t_1) \rangle e^{-i \int_0^{t_1} dt E_0(t)}. \quad (2.16)$$

Au premier ordre, donc, on a une combinaison linéaire d'états appartenant au sous-espace complémentaire de $|0(T)\rangle$. On peut donc dire que ce terme est lié à une "transition" relativement au spectre. En fait, la façon d'interpréter l'intégrand dans l'équation (2.16) est la suivante : comme on part dans l'état $|0(0)\rangle$, il y a évolution adiabatique de l'état de $t = 0$ à $t = t_1$ (i.e. $e^{-i \int_0^{t_1} dt E_0(t)}$). Au temps t_1 , il y a une transition vers l'état $|m(t_1)\rangle$ (i.e. $\langle \dot{m}(t_1) | 0(t_1) \rangle$); ensuite cet état évolue

adiabatement jusqu'à $t = T$ (i.e. $e^{-i \int_{t_1}^T dt E_m(t)}$). Comme en réalité la transition peut se produire à n'importe quel temps de l'intervalle, on doit intégrer le temps de transition sur l'intervalle.

À l'ordre zéro, il n'y a pas de transition, rien qu'une évolution adiabatique. Au premier ordre, il y a une seule transition avec des évolutions adiabatiques. On peut s'attendre à ce qu'il y ait deux transitions dans le terme de deuxième ordre. Comme de fait, à l'ordre ϵ^2 , on garde deux termes de type $\epsilon \langle \dot{m}_{j+1}(t_j) | m_j(t_j) \rangle$ et $N - 2$ fonctions delta. On peut deviner la forme du terme au deuxième ordre :

$$|\psi(T)\rangle^{(2)} = \sum_{m \neq n} \sum_{n \neq 0} |m(T)\rangle \int_0^T dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 e^{-i \int_{t_2}^T dt E_m(t)} \langle \dot{m}(t_2) | n(t_2) \rangle e^{-i \int_{t_1}^{t_2} dt E_n(t)} \langle \dot{n}(t_1) | 0(t_1) \rangle e^{-i \int_0^{t_1} dt E_0(t)}. \quad (2.17)$$

On interprète l'intégrand de la façon suivante : il y a évolution adiabatique à partir de l'état initial jusqu'au temps t_1 . À $t = t_1$, il y a une transition vers l'état $|n(t_1)\rangle$. Il y a ensuite une évolution adiabatique jusqu'au temps $t_2 (> t_1)$, suivi d'une transition vers l'état $|m(t_2)\rangle$ qui est elle-même suivie d'une évolution adiabatique jusqu'à $t = T$. Encore une fois, les temps auxquels surviennent les transitions sont intégrés (avec la condition $t_2 > t_1$) et l'état intermédiaire $|n\rangle$ est sommé sur tout le spectre excepté l'état initial (pour qu'il y ait bien transition). On peut donc donner un sens physique aux expressions dans l'intégrand :

$$e^{-i \int_{t_1}^{t_2} dt E_n(t)} \rightarrow \text{évolution adiabatique de l'état } |n(t)\rangle \text{ entre } t = t_1 \text{ et } t = t_2, \\ \langle \dot{m}(t') | n(t') \rangle \rightarrow \text{transition à } t = t' \text{ de l'état } |n(t')\rangle \text{ vers l'état } |m(t')\rangle. \quad (2.18)$$

Et avec cette interprétation, on comprend que l'ordre des termes dans le développement est lié au nombre de transitions survenues durant l'évolution sur l'intervalle de temps $[0, T]$. Plus précisément, le terme d'ordre k de la série regroupe les processus durant lesquels se produisent k transitions.

Il existe également une représentation diagrammatique pour les expressions dans

(2.18) (comme pour les diagrammes de Feynman où à chaque morceau qui constitue les diagrammes est associé une expression algébrique) :

$$\begin{aligned} \underline{n} &\rightarrow e^{-i \int_0^T dt E_n(t)} \\ n \int_{t'}^m &\rightarrow \langle \dot{m}(t') | n(t') \rangle \end{aligned} \quad (2.19)$$

où il est sous-entendu que la flèche du temps va de gauche à droite. Avec ces "pièces de base", on peut trouver la représentation diagrammatique des termes déjà trouvés en (2.14), (2.16) et (2.17) et deviner celle des autres termes, de sorte que :

$$\begin{aligned} |\psi(T)\rangle &= |\psi(T)\rangle^{(0)} + |\psi(T)\rangle^{(1)} + |\psi(T)\rangle^{(2)} + \dots \\ |\psi(T)\rangle &= \underline{0} + \underline{0} \int_{t_1}^m + \underline{0} \int_{t_1}^n \int_{t_2}^m + \dots \end{aligned} \quad (2.20)$$

où il est sous-entendu que les temps auxquels arrivent les transitions sont intégrés sur l'intervalle et les états intermédiaires n et finaux m sont sommés. Avec la représentation diagrammatique, il est facile d'écrire l'expression algébrique pour $|\psi(T)\rangle^{(k)}$ à n'importe quel ordre.

On peut terminer cette section en rappelant que l'approximation adiabatique en termes de ce nouveau développement, s'écrit comme :

$$|\psi(T)\rangle \approx |\psi(T)\rangle^{(0)} = e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} |0(T)\rangle. \quad (2.21)$$

2.2 Lien avec le développement conventionnel

Si on se rappelle la présentation de l'approximation adiabatique faite au chapitre précédent, nous avons également une façon d'écrire l'état quantique d'un objet comme un développement perturbatif. De plus, l'ordre des termes dans ce développement était, comme pour le présent développement présenté dans ce cha-

pitre, un indicateur du nombre d'expressions de types $\langle \dot{n}_1(t) | n_2(t) \rangle$ présentes dans ces termes. On peut donc se demander à quel point les deux développements sont différents. En fait, si on regarde attentivement, on peut se rendre compte que les deux développements sont équivalents !

En effet, si on regarde le terme d'ordre zéro du développement présenté au chapitre précédent (que nous appellerons dorénavant le *développement conventionnel*), nous avons (voir les équations (1.3) et (1.8)) :

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle^{(0)} &= \sum_m a_m^{(0)}(t) e^{-i \int_0^t dt' E_m(t')} |m(t)\rangle \\
 &= \sum_m \delta_{m0} e^{-i \int_0^t dt' E_m(t')} |m(t)\rangle \\
 &= e^{-i \int_0^t dt' E_0(t')} |0(t)\rangle, \tag{2.22}
 \end{aligned}$$

pour un état initial $|0(0)\rangle$. Ceci revient exactement au terme d'ordre zéro dans le nouveau développement présenté dans ce chapitre (voir (2.14)). On peut également regarder le terme de premier ordre du développement conventionnel :

$$\begin{aligned}
 |\psi(t)\rangle^{(1)} &= \sum_m a_m^{(1)}(t) e^{-i \int_0^t dt' E_m(t')} |m(t)\rangle \\
 &= \sum_m - \left(\int_0^t dt' \langle m(t') | \dot{0}(t') \rangle e^{-i \int_0^{t'} dt'' (E_0(t'') - E_m(t''))} \right) e^{-i \int_0^t dt'' E_m(t'')} |m(t)\rangle \\
 &= \sum_{m \neq 0} \left(\int_0^t dt' e^{-i \int_0^{t'} dt'' E_m(t'')} \langle \dot{m}(t') | 0(t') \rangle e^{-i \int_0^{t'} dt'' E_0(t'')} \right) |m(t)\rangle. \tag{2.23}
 \end{aligned}$$

où on s'est servi du fait que :

$$\begin{aligned}
 1) \quad 0 &= \frac{d}{dt} (\langle m(t) | 0(t) \rangle) \Leftrightarrow \langle m(t) | \dot{0}(t) \rangle = - \langle \dot{m}(t) | 0(t) \rangle, \\
 2) \quad &\langle 0(t) | \dot{0}(t) \rangle = 0 \\
 3) \quad &e^{+i \int_0^{t'} dt'' E_m(t'')} e^{-i \int_0^t dt'' E_m(t'')} = e^{-i \int_{t'}^t dt'' E_m(t'')} \tag{2.24}
 \end{aligned}$$

quand t' est ensuite intégré de 0 à t . Ce terme correspond exactement à ce que nous avons trouvé pour la correction de premier ordre dans notre développement

(voir (2.16)). Par un procédé similaire, on peut montrer que les termes d'ordres supérieurs du développement conventionnel et ceux du développement présenté dans ce chapitre sont équivalents. L'avantage du nouveau développement réside en le fait qu'il permet une interprétation physique plus facile et très élégante de chaque terme ainsi qu'une représentation diagrammatique qui permet d'écrire les termes de la série à n'importe quel ordre sans aucune difficulté.

2.3 En résumé

Nous venons donc, dans ce chapitre, d'exprimer l'état quantique d'un objet (décrit par $\hat{H}(t)$ et initialement dans un état propre d'énergie) comme une série dont les termes regroupent les processus selon le nombre de transitions qu'a subit le système pendant l'intervalle de temps considéré. Ainsi, le terme d'ordre zéro représente le processus pendant lequel aucune transition se produit. Le terme de premier ordre regroupe les processus pour lesquels le système subit une seule transition ; et ainsi de suite. Nous verrons maintenant que la convergence de ce développement est fortement influencée par le degré d'adiabaticité du système (i.e. la lenteur du système) ainsi que par la longueur de l'intervalle de temps $[0, T]$.

CHAPITRE 3

LA CONVERGENCE DU DÉVELOPPEMENT ET L'INFLUENCE DU TEMPS SUR L'APPROXIMATION ADIABATIQUE

Nous venons de voir au chapitre précédent que l'état quantique d'un objet au temps T peut être écrit comme un développement dont l'ordre des termes est lié au nombre de transitions qu'a subi le système pendant l'intervalle de temps considéré. Mais ce développement, quoique très élégant, reste effectivement utile que si les termes deviennent de plus en plus petits, de façon à ce qu'on puisse tronquer la série après avoir calculé le nombre de termes désiré. Autrement dit, il est important de se pencher sur la convergence de la série que constitue le développement présenté au chapitre précédent.

Dans ce chapitre, nous allons donc nous concentrer sur une analyse de la convergence de la série trouvée au chapitre précédent. Cette analyse pourra sembler quelque peu "rugueuse" à première vue car, pour étudier la convergence de la série, nous nous contenterons d'estimer l'ordre de grandeur des termes de cette série et de regarder sous quelles conditions il y a convergence. Par contre, cette méthode aura l'avantage de conserver un caractère général et elle mettra clairement en évidence, sans artifices secondaires, le lien qui unit le *degré d'adiabaticité* du système étudié, la longueur de l'intervalle $[0, T]$ (i.e la durée de l'expérience) et la convergence de la série.

Plus précisément, la plupart de la littérature traitant sur l'approximation adiabatique ne semble pas impliquer indépendamment la durée de l'intervalle de temps considéré dans leur analyse. Ici, nous le ferons, et en étudiant sous quelles conditions le développement présenté au chapitre précédent converge, on pourra du même coup étudier la validité de l'approximation adiabatique et le rôle joué par le degré d'adiabaticité du système ainsi que la durée de l'intervalle $[0, T]$ dans cette histoire.

Ceci est dû au fait que l'approximation adiabatique peut s'écrire comme :

$$|\psi(T)\rangle \approx |\psi(T)\rangle^{(0)} = e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} |0(T)\rangle. \quad (3.1)$$

La grandeur des termes d'ordres supérieurs dans la série nous renseigne donc sur la validité de l'approximation adiabatique.

Donc, le développement présenté au dernier chapitre n'est pas qu'une autre façon d'écrire l'état quantique d'un système ; il s'avèrera qu'il constitue également une fenêtre par laquelle on peut sonder la validité de l'approximation adiabatique.

3.1 Description du type de système analysé

Nous allons, comme au chapitre précédent, considérer ici un système décrit par un Hamiltonien $\hat{H}(t)$ ayant des états propres instantanés $|n(t)\rangle$ et des valeurs propres $E_n(t)$. Par contre, nous ferons ici l'hypothèse qu'il est possible d'écrire ce Hamiltonien comme :

$$\hat{H}(t) = E\hat{h}(t/\tau) \quad (3.2)$$

où E est l'énergie caractéristique du système (et donc, ici, l'ordre de grandeur des énergies également) et τ représente l'échelle de temps caractéristique de changement du Hamiltonien dans le temps. En termes de la variable sans dimension $s = t/\tau$, la relation entre les états propres et valeurs propres d'énergie $\hat{H}(t) |n(t)\rangle = E_n(t) |n(t)\rangle$ devient :

$$\hat{h}(s) |\hat{n}(s)\rangle = \epsilon_n(s) |\hat{n}(s)\rangle \quad (3.3)$$

où $\epsilon_n(s) \equiv \tilde{E}_n(s)/E$ représente les énergies propres sans dimension. Nous travaillons dans ce chapitre avec des quantités sans dimension car cela facilitera la mise en évidence du rôle du degré d'adiabaticité du système sur la convergence de notre série. Le fait qu'on puisse déterminer une échelle de temps caractéristique de changement du Hamiltonien dans le temps τ implique pour les états que :

$$|\langle \hat{m}'(s) | \hat{n}(s) \rangle| \sim O(1) \text{ (pour } n \neq m \text{ car } \langle \hat{n}'(s) | \hat{n}(s) \rangle = 0 \forall n, s), \quad (3.4)$$

où $\langle \hat{m}'(s) | \equiv \frac{d}{ds} \langle \hat{m}(s) |$.

Également, nous ferons ici deux hypothèses supplémentaires. La première étant que le spectre d'énergie du système possède la propriété suivante :

$$|\epsilon_n(s) - \epsilon_m(s)| \geq 1 \quad \forall s \text{ et } n \neq m, \quad (3.5)$$

ce qui revient à dire que la différence entre deux niveaux d'énergie est d'au moins l'énergie caractéristique E , mais de l'ordre de l'unité. La deuxième hypothèse étant que les quantités impliquées dans (3.4) et (3.5), soient $\langle \hat{m}'(s) | \hat{n}(s) \rangle$ et $\epsilon_n(s)$ possèdent des dérivées définies et finies $\forall s, m, n$.

Les Hamiltoniens possédant les caractéristiques tout juste présentées seront dits *Hamiltoniens génériques*.

Au chapitre précédent, nous avons vu qu'on pouvait exprimer l'état quantique d'un système au temps T qui était initialement dans l'état $|0(0)\rangle$ comme :

$$|\psi(T)\rangle = |\psi(T)\rangle^{(0)} + |\psi(T)\rangle^{(1)} + |\psi(T)\rangle^{(2)} + \dots \quad (3.6)$$

où

$$\begin{aligned} |\psi(T)\rangle^{(0)} &= e^{-i \int_0^T dt E_0(t)} |0(T)\rangle \\ |\psi(T)\rangle^{(1)} &= \sum_{m \neq 0} |m(T)\rangle \int_0^T dt_1 e^{-i \int_{t_1}^T dt E_m(t)} \langle \hat{m}(t_1) | 0(t_1) \rangle e^{-i \int_0^{t_1} dt E_0(t)} \\ |\psi(T)\rangle^{(2)} &= \dots \\ &\dots, \end{aligned} \quad (3.7)$$

avec la restriction que $\langle \hat{m}(t) | m(t) \rangle = 0 \quad \forall m, t$.

En termes des quantités sans dimension, cela devient :

$$|\hat{\psi}(S)\rangle = |\hat{\psi}(S)\rangle^{(0)} + |\hat{\psi}(S)\rangle^{(1)} + |\hat{\psi}(S)\rangle^{(2)} + \dots \quad (3.8)$$

où

$$\begin{aligned}
 |\hat{\psi}(S)\rangle^{(0)} &= e^{-i\lambda \int_0^S ds \epsilon_0(s)} |\hat{0}(S)\rangle \\
 |\hat{\psi}(S)\rangle^{(1)} &= \sum_{m \neq 0} |\hat{m}(S)\rangle \int_0^S ds_1 e^{-i\lambda \int_{s_1}^S ds \epsilon_m(s)} \langle \hat{m}'(s_1) | 0(s_1) \rangle e^{-i\lambda \int_0^{s_1} ds \epsilon_0(s)} \\
 |\hat{\psi}(S)\rangle^{(2)} &= \dots \\
 &\dots,
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

avec $\lambda \equiv E\tau$. Cette quantité, λ , est très importante car elle représente le degré d'adiabaticité du système. Plus λ est grand, plus le système respecte notre idée intuitive d'un système qui évolue *lentement*.

3.2 Analyse de la convergence du développement

Nous sommes maintenant prêt à discuter de la convergence de la série. D'emblée, une chose est digne de mention. Dans notre analyse, nous considérons trois échelles de temps indépendantes. Soient E^{-1} , l'inverse de l'énergie caractéristique du système; τ , l'échelle de temps caractéristique de changement du Hamiltonien dans le temps et T (qu'on notera $S = T/\tau$ en termes de variables sans dimension) qui représente le temps de durée de l'expérience. Dans la littérature portant sur l'approximation adiabatique, la plupart des travaux considèrent $T = \tau$. Pour garder un caractère plus général, nous faisons ici la distinction afin considérer la durée de l'intervalle de temps de façon indépendante.

Si nous regardons les termes de la série (3.6), on voit que le terme d'ordre k possède k facteurs de type $\langle \dot{m}(t) | n(t) \rangle$. Pour un Hamiltonien qui varie lentement, on s'attend à ce que de tels facteurs soient petits et on pourrait s'attendre à ce que la série converge. Mais il faut faire attention car ces facteurs sont intégrés k fois sur une période de temps qui peut compenser pour leur petitesse.

Pour un cas non-adiabatique, ($\lambda \sim 1$), on peut estimer l'ordre de grandeur des termes de la série. Les intégrants étant des fonctions lentes du temps de l'ordre de l'unité, on estime l'ordre de grandeur du terme d'ordre k (qui contient k intégrales

sur le temps) comme étant :

$$\left\| \left| \hat{\psi}(S) \right\rangle^{(k)} \right\| \sim S^k = (T/\tau)^k. \quad (3.10)$$

C'est donc dire que, grossièrement, d'après cette analyse dimensionnelle, les termes d'ordres supérieurs ($k \geq 1$) deviennent importants (i.e. de même grandeur que $|\psi(S)\rangle^{(0)}$ qui est de l'ordre de l'unité) lorsque $T \sim \tau$. Autrement dit, l'estimé de ces termes d'ordres supérieurs qui contiennent les termes de transitions nous indique qu'après un temps $T \sim \tau$, il y a une probabilité non négligeable que l'état ait fait une transition dans le spectre. Nous appellerons ce temps, le *temps de dépeuplement* de l'état initial.

Voyons maintenant ce qui se passe pour un cas adiabatique, c'est-à-dire pour $\lambda \gg 1$. Pour ce faire, nous allons réécrire l'état $|\hat{\psi}(S)\rangle$ comme :

$$|\hat{\psi}(S)\rangle = e^{-i\lambda \int_0^S ds \epsilon_0(s)} \sum_m A_m(S) |\hat{m}(S)\rangle. \quad (3.11)$$

Étant donné l'équation (3.8), on peut écrire $A_m(S)$ comme :

$$A_m(S) = A_m^{(0)}(S) + A_m^{(1)}(S) + A_m^{(2)}(S) + \dots, \quad (3.12)$$

de sorte que l'ordre des termes soit compris dans les $A_m^{(k)}(S)$:

$$\left| \hat{\psi}(S) \right\rangle^{(k)} = e^{-i\lambda \int_0^S ds \epsilon_0(s)} \sum_m A_m^{(k)}(S) |\hat{m}(S)\rangle. \quad (3.13)$$

Il s'agit donc maintenant d'estimer l'ordre de grandeur des $A_m^{(k)}(S)$ pour obtenir l'ordre de grandeur des termes de notre série (car ${}^{(k)}\langle \hat{\psi}(S) | \hat{\psi}(S) \rangle^{(k)} = \sum_m |A_m^{(k)}(S)|^2$).

Une observation clé qu'on peut faire est la suivante. Si l'on regarde l'expansion trouvée sous sa forme diagrammatique (équation (2.20)), il est clair qu'un terme d'ordre k comme $A_m^{(k)}(S)$ est constitué du terme d'ordre $k-1$ pour un certain état final n au temps s' , ($A_n^{(k-1)}(s')$), suivi d'une transition supplémentaire au temps s' vers l'état final m ainsi que d'une évolution adiabatique (dans l'état m) de s'

Tout d'abord, selon la définition de $\gamma_{ab}(s_1, s_2)$, on peut réécrire $A_m^{(1)}(S)$ comme :

$$A_{m \neq 0}^{(1)}(S) = e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \underbrace{\int_0^S ds_1 e^{+i\lambda\gamma_{m0}(s_1)} \langle \hat{m}' | \hat{0} \rangle_{s_1}}_{I_1} \quad (3.18)$$

où $\gamma_{m0}(s') \equiv \int_0^{s'} ds (\epsilon_m(s) - \epsilon_0(s))$ et $\langle \hat{0}' | \hat{0} \rangle = 0$. On peut également réécrire l'intégrale I_1 dans (3.18) comme :

$$I_1 = \frac{1}{\lambda} \int_0^S ds_1 \frac{d}{ds_1} \left(e^{+i\lambda\gamma_{m0}(s_1)} G_{m0}(s_1) \right) \quad (3.19)$$

où $G_{m0}(s_1) = \frac{\langle \hat{m}' | \hat{0} \rangle_{s_1}}{i\dot{\gamma}_{m0}(s_1)}$ avec $\dot{\gamma}_{m0}(s_1) \equiv \frac{d}{ds_1} [\int_0^{s_1} ds (\epsilon_m(s) - \epsilon_0(s))] = \epsilon_m(s_1) - \epsilon_0(s_1)$. (Il est à noter que $\dot{\gamma}_{m0}(s) \sim 1$ et donc $|G_{m0}(s)| \sim 1 \forall s$.) On se rappelle ensuite que dans la limite adiabatique, λ devient très grand, et on peut traiter l'exponentielle imaginaire dans I_1 comme un facteur d'oscillation rapide qui multiplie une fonction évoluant lentement dans le temps. Si on considère également des temps suffisamment grands de sorte que $\lambda S \gg 1$, alors pour un certain intervalle de temps, l'exponentielle imaginaire aura le temps de parcourir plusieurs cycles tandis que la fonction lente qui la multiplie sera à peu près constante. On s'attend donc à ce qu'il y ait certaines annulations et que la valeur de l'intégrale soit plus petite que pour une intégrale similaire mais dans un cas non-adiabatique ($\lambda \sim 1$). Avec ceci, on peut évaluer I_1 par parties pour obtenir :

$$I_1 = e^{+i\lambda\gamma_{m0}(S)} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{0} \rangle_S}{i\lambda\dot{\gamma}_{m0}(S)} - \frac{\langle \hat{m}' | \hat{0} \rangle_0}{i\lambda\dot{\gamma}_{m0}(0)} - O(1/\lambda^2). \quad (3.20)$$

Comme on veut estimer l'ordre de grandeur des termes de la série, on laissera tomber le dernier terme ; terme qui est négligeable par rapport aux premiers dans la limite d'un λ grand. Avec ceci :

$$\begin{aligned} A_{m \neq 0}^{(1)}(S) &\approx \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{0} \rangle_S}{i\dot{\gamma}_{m0}(S)} - e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{0} \rangle_0}{i\dot{\gamma}_{m0}(0)} \right) \\ A_0^{(1)}(S) &= 0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

On voit donc que $A_m^{(1)}(S)$ est de l'ordre de $1/\lambda$. Maintenant, nous allons voir si $A_m^{(k)}(S) \sim O(1/\lambda^k)$.

Si on plonge (3.21) (qui est la partie dominante de $A_m^{(1)}(S)$) dans (3.15), on peut estimer l'ordre de grandeur de $A_m^{(2)}(S)$:

$$A_m^{(2)}(S) \approx e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \sum_{n \neq m, 0} \int_0^S ds_2 e^{+i\lambda\gamma_{m0}(s_2)} \langle \hat{n}' | \hat{n} \rangle_{s_2} \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_{s_2}}{i\dot{\gamma}_{n0}(s_2)} - e^{-i\lambda\gamma_{n0}(s_2)} \frac{\langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_0}{i\dot{\gamma}_{n0}(0)} \right). \quad (3.22)$$

Ici, par contre, il faut compter deux cas distincts : $A_0^{(2)}(S)$ et $A_{m \neq 0}^{(2)}(S)$. Pour $A_{m \neq 0}^{(2)}(S)$, on se retrouve avec des intégrales similaires à (3.19) qu'on peut approximer de façon analogue :

$$\begin{aligned} A_{m \neq 0}^{(2)}(S) &\approx \frac{-e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)}}{\lambda^2} \sum_{n \neq m, 0} \left[e^{+i\lambda\gamma_{m0}(s_2)} \tilde{G}_{mn0}(s_2) + e^{-i\lambda\gamma_{nm}(s_2)} \tilde{F}_{mn0}(s_2) \right]_0^S \\ &= \frac{-1}{\lambda^2} \sum_{n \neq m, 0} \left[\tilde{G}_{mn0}(S) + e^{-i\lambda\gamma_{n0}(S)} \tilde{F}_{mn0}(S) - e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \left(\tilde{G}_{mn0}(0) + \tilde{F}_{mn0}(0) \right) \right] \end{aligned} \quad (3.23)$$

où $\tilde{G}_{mn0}(s) = \frac{\langle \hat{n}' | \hat{n} \rangle_s \langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_s}{\dot{\gamma}_{m0}(s) \dot{\gamma}_{n0}(s)} \sim O(1)$ et $\tilde{F}_{mn0}(s) = \frac{\langle \hat{n}' | \hat{n} \rangle_s \langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_0}{\dot{\gamma}_{nm}(s) \dot{\gamma}_{n0}(0)} \sim O(1)$.

Pour $A_0^{(2)}(S)$, on a :

$$\begin{aligned} A_0^{(2)}(S) &\approx \sum_{n \neq 0} \int_0^S ds_2 \langle \hat{0}' | \hat{n} \rangle_{s_2} \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_{s_2}}{i\dot{\gamma}_{n0}(s_2)} - e^{-i\lambda\gamma_{n0}(s_2)} \frac{\langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_0}{i\dot{\gamma}_{n0}(0)} \right) \\ &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq 0} \int_0^S ds_2 \left(\frac{\langle \hat{0}' | \hat{n} \rangle_{s_2} \langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_{s_2}}{i\dot{\gamma}_{n0}(s_2)} - e^{-i\lambda\gamma_{n0}(s_2)} \frac{\langle \hat{0}' | \hat{n} \rangle_{s_2} \langle \hat{n}' | \hat{0} \rangle_0}{i\dot{\gamma}_{n0}(0)} \right). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Le deuxième terme dans cette expression est une intégrale du même type que (3.19) ; et donc le deuxième terme sera dominé par une expression de l'ordre de $1/\lambda^2$. Par contre, si on observe le premier terme, on voit qu'il n'y a pas de facteur oscillatoire rapide de type $e^{-i\lambda\gamma(s)}$ dans l'intégrand et donc on ne peut pas utiliser la même technique qu'on a utilisé pour l'intégrale (3.19) afin d'estimer son ordre de grandeur. Mais si on regarde l'intégrand du premier terme, on voit que c'est une fonction de l'ordre de l'unité, et on peut donc estimer le premier terme comme

On voit que si $m = 0$ ou $m = n'$, on aura des termes qui ne seront **pas** multipliés par un facteur d'oscillation rapide (de type $e^{-i\lambda\gamma(s)}$) et ces termes intégrés attraperont (comme pour $A_0^{(2)}(S)$) un facteur S . Ces termes seront donc de l'ordre de S/λ^2 . Les autres termes possédant un facteur d'oscillation rapide; ils donneront lieu à des intégrales de type (3.19) et ces termes seront de l'ordre de $1/\lambda^3$. Pour estimer maintenant T_2 , on remplace $A_0^{(2)}(S)$ par son expression trouvée ci-haut :

$$T_2 = e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \sum_{n \neq m, 0} \int_0^S ds_2 e^{+i\lambda\gamma_{m0}(s_2)} \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_2} \cdot$$

$$\frac{1}{\lambda} \sum_{l \neq 0} \left(\underbrace{\int_0^{s_2} ds_3 \frac{\langle \hat{0}' | \hat{l} \rangle_{s_3} \langle \hat{l}' | \hat{0} \rangle_{s_3}}{i\dot{\gamma}_{l0}(s_3)}}_{O(S)} - \underbrace{\int_0^{s_2} ds_3 e^{-i\lambda\gamma_{l0}(s_3)} \frac{\langle \hat{0}' | \hat{l} \rangle_{s_3} \langle \hat{l}' | \hat{0} \rangle_0}{i\dot{\gamma}_{l0}(0)}}_{O(1/\lambda)} \right) \quad (3.29)$$

Le terme de l'ordre de S entre les parenthèses (dans (3.29)) sera multiplié par un facteur oscillatoire et intégré sur ds_2 (comme on l'a fait pour (3.19)) pour donner un terme de l'ordre de S/λ^2 . Le terme de l'ordre de $1/\lambda$ entre les parenthèses, quant à lui, donnera des termes de l'ordre de S/λ^2 lors d'une annulation du facteur d'oscillation ($m = l$) et des termes de l'ordre de $1/\lambda^3$ lors de présence d'un facteur d'oscillation rapide non-nul ($m \neq l$). Donc, $A_m^{(3)}(S)$ sera dominé par des termes de l'ordre de S/λ^2 dans la limite d'un λ très grand.

Nous venons donc d'estimer les termes de notre série jusqu'au troisième ordre, et il semble difficile de trouver une formule générale pour l'ordre de grandeur des termes à un ordre quelconque.

3.3 Analyse reformulée de la convergence du développement

3.3.1 Réécriture des $A^{(k)}(S)$ en termes des $X^{(k)}(S)$

Une chose qu'on peut remarquer en observant les expressions de $A_m^{(1)}(S)$, $A_m^{(2)}(S)$ et $A_m^{(3)}(S)$ calculées à la section précédente est que chacun de ces termes peut s'écrire comme une somme d'exponentielles de type $e^{-i\lambda\gamma_{p0}(s)}$ (avec p couvrant tout

le spectre) multipliées par un facteur qui peut être considéré comme une fonction évoluant lentement dans le temps. Autrement dit, en observant les $A_m^{(k)}(S)$ calculés à la section précédente, on voit qu'on peut les écrire comme :

$$A_m^{(k)}(S) \equiv \sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)} \quad (3.30)$$

avec $X_{mp}^{(k)}(S)$ contenant tous les facteurs évoluant lentement dans le temps et p couvrant tout le spectre.

Si on réécrit la relation de récurrence (équation (3.15)) en termes des $X_{mp}^{(k)}$, on obtient :

$$\begin{aligned} \underbrace{\sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)}}_{A_m^{(k)}(S)} &= e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \sum_n \int_0^S ds_k e^{+i\lambda\gamma_{m0}(s_k)} \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} \underbrace{\sum_q X_{nq}^{(k-1)}(s_k) e^{-i\lambda\gamma_{q0}(s_k)}}_{A_n^{(k-1)}(s_k)} \\ &= e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \sum_n \sum_q \underbrace{\int_0^S ds_k e^{-i\lambda\gamma_{qm}(s_k)} \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} X_{nq}^{(k-1)}(s_k)}_I. \end{aligned} \quad (3.31)$$

On peut maintenant évaluer l'intégrale I dans (3.31). Il faut compter deux cas distincts, $q \neq m$ et $q = m$. Pour $q \neq m$, l'intégrand de I contient un facteur d'oscillation rapide $e^{-i\lambda\gamma_{qm}(s_k)}$ non-nul, et comme le reste de l'intégrand est une fonction lente de s_k , on peut évaluer cette intégrale comme on a évalué l'intégrale (3.19) sous les conditions $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \gg 1$:

$$I_{q \neq m} \approx \frac{1}{\lambda} \left(e^{-i\lambda\gamma_{qm}(S)} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S}{-i\dot{\gamma}_{qm}(S)} X_{nq}^{(k-1)}(S) - \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0) \right). \quad (3.32)$$

Pour le cas $q = m$, on se retrouve avec :

$$I_{q=m} = \int_0^S ds_k \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} X_{nm}^{(k-1)}(s_k), \quad (3.33)$$

qu'on estime être de l'ordre de :

$$I_{q=m} \approx S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S), \quad (3.34)$$

car on réitère que $\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} X_{nm}^{(k-1)}(s_k)$ est une fonction évoluant lentement dans le temps.

On obtient donc une relation de récurrence en termes des $X_{mp}^{(k)}$:

$$\begin{aligned} \sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)} \approx \\ \sum_n \sum_{q \neq m} \frac{1}{\lambda} \left(e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S}{-i\dot{\gamma}_{qm}(S)} X_{nq}^{(k-1)}(S) - e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0) \right) \\ + \sum_n e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S), \end{aligned} \quad (3.35)$$

qu'on peut réécrire comme :

$$\begin{aligned} \sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)} \approx \\ \sum_{n \neq m} \sum_{q \neq m} \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S}{-i\dot{\gamma}_{qm}(S)} X_{nq}^{(k-1)}(S) \right) e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} \\ + \sum_{n \neq m} \left(S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S) - \frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0) \right) e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

où on a réorganisé les termes selon les exponentielles et retiré le cas $n = m$ qui, à cause de la restriction $\langle \hat{m}' | \hat{m} \rangle_s = 0 \forall s, m$, donne une contribution nulle à la somme.

Maintenant arrive un argument crucial. Les exponentielles imaginaires étant des termes oscillatoires évoluant rapidement dans le temps (pour un cas adiabatique) ; deux exponentielles ayant des fonctions différentes comme argument oscilleront de façon fort différente l'une de l'autre (car les deux exponentielles imaginaires n'auront pas la même période). Donc, après un certain temps, les différentes exponentielles imaginaires dans (3.36) auront le temps de se distinguer les unes des autres, et nous pourrions argumenter que les facteurs multipliant une exponentielle donnée de chaque côté de l'équation (3.36) seront égaux. Autrement dit, le fait que les exponentielles imaginaires n'oscillent pas avec la même fréquence nous permet

de poser :

$$\begin{aligned}
 \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} : \quad X_{mm}^{(k)}(S) &= \sum_{n \neq m} \left(S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S) - \frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0) \right) \\
 \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} : \quad X_{mq}^{(k)}(S) &= \frac{1}{\lambda} \sum_n \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S}{-i\dot{\gamma}_{qm}(S)} X_{nq}^{(k-1)}(S) \quad (q \neq m), \tag{3.37}
 \end{aligned}$$

valides pour $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \gg 1$.

Nous avons donc une relation de récurrence liant les $X^{(k)}$ aux $X^{(k-1)}$. Étant donné la définition (3.30), on sait que l'ordre de grandeur des $X^{(k)}(S)$ nous renseigne directement sur celle des $A^{(k)}(S)$. En fait, nous sommes à une étape près de trouver une expression générale pour l'ordre de grandeur des $X^{(k)}(S)$ à un ordre quelconque, et donc des $A^{(k)}(S)$.

Nous essayerons maintenant d'argumenter que le terme " $\frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0)$ " est négligeable par rapport à " $\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S S X_{nm}^{(k-1)}(S)$ " dans l'équation (3.37). Cet effort supplémentaire aura le bénéfice d'ouvrir la porte à une conclusion relativement facile à tirer sur l'ordre de grandeur des $X^{(k)}(S)$.

Pour ce faire, nous procéderons un peu comme nous venons tout juste de faire, c'est-à-dire trouver une relation de récurrence entre les $X^{(k)}$ et $X^{(k-1)}$, mais cette fois-ci avec un temps S qui tend vers zéro, (les relations (3.37) n'étant pas valides pour des temps très courts). En effet, il faudra passer par là pour estimer les $X^{(k)}(0)$. Les termes $A_m^{(k)}(S)$ étant définis (pour $k \geq 1$) comme des intégrales sur l'intervalle $[0, S]$ (voir les termes de (3.8)); et comme $A_m^{(0)}(S) = \delta_{m0}$, on sait que nous avons la condition initiale :

$$A_m^{(k)}(0) = \delta_{k0} \delta_{m0}, \tag{3.38}$$

qui revient à :

$$\sum_p X_{mp}^{(k)}(0) = \delta_{k0} \delta_{m0} \tag{3.39}$$

en termes des $X_{mp}^{(k)}$. Malheureusement, nous ne pouvons utiliser cette condition pour évaluer le terme " $\frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0)$ " dans l'équation (3.37) car les coefficients des $X_{nq}^{(k-1)}(0)$ dans la somme dépendent de l'indice q . Il faudra donc trouver

une façon d'évaluer les $X_{nq}^{(k-1)}(0)$ individuellement. C'est ce que nous tenterons de faire ici.

3.3.2 Estimation de $X^{(k)}(0)$

Si nous revenons à la relation de récurrence générale en terme des $X^{(k)}$ (équation (3.31)) :

$$\underbrace{\sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)}}_{A_m^{(k)}(S)} = e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} \sum_n \sum_q \underbrace{\int_0^S ds_k e^{-i\lambda\gamma_{qm}(s_k)} \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} X_{nq}^{(k-1)}(s_k)}_I, \quad (3.40)$$

on peut tenter d'évaluer l'intégrale I sous les conditions $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \ll 1$ qui nous permettent de prendre la limite $S \rightarrow 0$ tout en restant dans un cas adiabatique. Sous ces conditions, on couvre seulement qu'un court intervalle de temps, et les fonctions dites "lentes" sont à peu près égales à leur valeur initiale. Autrement dit, on fera les approximations suivantes :

$$\begin{aligned} X_{nq}^{(k-1)}(s_k) &\approx X_{nq}^{(k-1)}(0) \\ \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} &\approx \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0, \end{aligned} \quad (3.41)$$

afin d'évaluer I sous les conditions prescrites. Également, nous pouvons développer la fonction $\gamma_{qm}(s_k)$ en une série de Taylor autour de $s_k = 0$ comme ceci :

$$\gamma_{qm}(s_k) = \underbrace{\gamma_{qm}(0)}_{=0} + \dot{\gamma}_{qm}(0)s_k + O(s_k^2) + \dots \quad (3.42)$$

Dans la limite où S est très petit, s_k , qui est intégré sur $[0, S]$, sera également petit et nous remplacerons $\gamma_{qm}(s_k)$ par $\dot{\gamma}_{qm}(0)s_k = (\epsilon_q(0) - \epsilon_m(0))s_k$ dans I . Avec tout ceci nous pouvons finalement évaluer I . Comme précédemment, il faudra distinguer deux cas, $q \neq m$ et $q = m$. Pour $q \neq m$, on aura :

$$I_{q \neq m} = \int_0^S ds_k e^{-i\lambda\gamma_{qm}(s_k)} \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} X_{nq}^{(k-1)}(s_k)$$

$$\begin{aligned}
&\approx \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0) \int_0^S ds_k e^{-i\lambda\dot{\gamma}_{qm}(0)s_k} \\
&= \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0) \frac{(e^{-i\lambda\dot{\gamma}_{qm}(0)S} - 1)}{-i\lambda\dot{\gamma}_{qm}(0)} \\
&\approx \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0) \frac{(e^{-i\lambda\dot{\gamma}_{qm}(S)} - 1)}{-i\lambda\dot{\gamma}_{qm}(0)}
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Pour le cas $q = m$, on aura :

$$\begin{aligned}
I_{q=m} &= \int_0^S ds_k \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_{s_k} X_{nm}^{(k-1)}(s_k) \\
&\approx \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nm}^{(k-1)}(0) \int_0^S ds_k \\
&= \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nm}^{(k-1)}(0) \cdot S.
\end{aligned} \tag{3.44}$$

On peut donc réécrire la relation de récurrence comme suit :

$$\begin{aligned}
\sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)} &\approx \\
&\frac{1}{\lambda} \sum_n \sum_{q \neq m} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} \\
&+ \sum_n \left(\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nm}^{(k-1)}(0) \cdot S + \frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)}.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Ici, maintenant, nous imposerons une restriction qui, sans être interdite, fera perdre un peu de généralité à notre analyse. Quand nous avons travaillé sur la relation de récurrence entre les $X^{(k)}(S)$ et $X^{(k-1)}(S)$ pour $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \gg 1$ (voir équation (3.36)), nous étions arrivés à un point où nous pouvions comparer les coefficients d'une exponentielle imaginaire donnée de chaque côté de l'égalité. Nous pouvions faire cela car, après un certain temps, les exponentielles imaginaires ayant des arguments différents se distinguent les unes des autres. Ici, clairement, comme nous considérons le cas où S est très petit (et à la limite $S \rightarrow 0$), les différentes exponentielles imaginaires n'auront pas le temps de se distinguer les unes des autres et seront à peu près égales (car $\gamma(0) = 0$). Dans ces conditions, ça ne va pas de

soi que les coefficients d'une exponentielle donnée de chaque côté de l'équation soient égaux. Par contre, ici, nous l'**imposerons**. Comme dit plutôt, cette restriction n'est pas interdite, mais fait perdre un peu de généralité à notre analyse. Par ailleurs, quand nous analyserons un cas concret au prochain chapitre, nous verrons en calculant les $A_m^{(k)}(S)$ pour les quelques premiers ordres que les $X^{(k)}(0)$ respectent naturellement la restriction que nous proposons d'imposer ici. Est-ce une particularité du système précis que nous analyserons au prochain chapitre? Ou en va-t-il de même pour n'importe quel système? La question reste ouverte. Mais pour la suite de cette analyse, nous ferons cette hypothèse.

Si nous imposons donc que les coefficients d'une exponentielle donnée soient égaux dans (3.45), alors on se retrouve avec ceci :

$$\begin{aligned} \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} : \quad X_{mm}^{(k)}(S) &= \sum_{n \neq m} \left(\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nm}^{(k-1)}(0) \cdot S + \frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \\ \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} : \quad X_{mq}^{(k)}(S) &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \quad (q \neq m). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Si on prend maintenant la limite $S \rightarrow 0$, alors on trouve :

$$\begin{aligned} X_{mm}^{(k)}(0) &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \\ X_{mq}^{(k)}(0) &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \quad (q \neq m), \end{aligned} \quad (3.47)$$

et si on calcule la somme $\sum_p X_{mp}^{(k)}(0)$, alors on trouve :

$$\begin{aligned} \sum_p X_{mp}^{(k)}(0) &= X_{mm}^{(k)}(0) + \sum_{q \neq m} X_{mq}^{(k)}(0) \\ &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\underbrace{\sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)}}_{X_{mm}^{(k)}(0)} \right) + \sum_{q \neq m} \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\underbrace{\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)}}_{X_{mq}^{(k)}(0)} \right) \\ &= 0, \end{aligned} \quad (3.48)$$

qui respecte bel et bien la condition initiale en (3.39). (La condition (3.39) est en effet respectée car les relations (3.47) ont été dérivées à partir de (3.40) qui est valide uniquement pour $k \geq 1$. Le cas $k = 0$ étant donc exclu, la somme $\sum_p X_{mp}^{(k)}(0) = 0 \forall k \geq 1$.)

On peut maintenant calculer $X^{(1)}(0)$:

$$\begin{aligned} X_{mm}^{(1)}(0) &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(0)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \\ X_{mq}^{(1)}(0) &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(0)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \quad (q \neq m). \end{aligned} \quad (3.49)$$

La condition (3.16) pour $k = 0$ peut se réécrire en termes des $X^{(0)}(S)$ comme :

$$\begin{aligned} A_m^{(0)}(S) = \delta_{m0} &\iff \sum_p X_{mp}^{(0)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)} = \delta_{m0} \quad \forall S \\ &\implies X_{mp}^{(0)}(S) = \delta_{m0}\delta_{p0} \quad \forall S. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Ceci nous permet donc de calculer $X^{(1)}(0)$:

$$\begin{aligned} X_{mm}^{(1)}(0) &\sim \frac{1}{\lambda}(1 - \delta_{m0}) \\ X_{mq}^{(1)}(0) &\sim \frac{1}{\lambda}(1 - \delta_{m0})\delta_{q0} \quad (q \neq m). \end{aligned} \quad (3.51)$$

En remettant (3.51) dans (3.47), on peut calculer $X^{(2)}(0)$ et on peut recommencer le processus pour calculer $X^{(k)}(0)$ et se rendre compte que $X^{(k)}(0) \sim O(1/\lambda^k)$.

Nous avons donc trouvé l'ordre de grandeur des $X^{(k)}(0)$ et nous pouvons maintenant comparer les termes " $\frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0)$ " et " $\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S S X_{nm}^{(k-1)}(S)$ " dans l'équation (3.37). Si nous revenons à l'équation (3.37), nous pouvons calculer $X^{(k)}(S)$ pour $k = 1$:

$$\begin{aligned} X_{mm}^{(1)}(S) &\sim \frac{1}{\lambda}(1 - \delta_{m0}) \\ X_{mq}^{(1)}(S) &\sim \frac{1}{\lambda}(1 - \delta_{m0})\delta_{q0} \quad (q \neq m). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Si nous utilisons maintenant les équations (3.37) et (3.52) pour évaluer $X_{nm}^{(k-1)}(S)$ pour $k > 1$ et $n \neq m$, on pourra déterminer que le terme de plus petit ordre possible constituant $X_{nm}^{(k-1)}(S)$ est de l'ordre de $(1/\lambda^{k-1})$ (i.e. on **ne peut pas** trouver un terme de plus petit ordre). Avec cela, on peut dire que le terme de plus petit ordre possible constituant " $S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S)$ " sera de l'ordre de (S/λ^{k-1}) tandis que $\frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0) \sim O(1/\lambda^k)$. Donc, dans la limite d'un λ grand, et pour $k > 1$, on pourra négliger " $\frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} X_{nq}^{(k-1)}(0)$ " par rapport à " $S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S)$ " dans (3.37). (Bien sûr, si $S \sim 1/\lambda$, alors on ne peut pas faire une telle opération; mais le terme " $S \cdot \langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S X_{nm}^{(k-1)}(S)$ " est pris sous la condition $\lambda S \gg 1$.)

3.3.3 La matrice C^p

Tout ce travail sur $X^{(k)}(0)$ nous permet maintenant de réécrire les relations de récurrence (équation (3.37)) dérivées pour les $X^{(k>1)}(S)$:

$$\begin{aligned} \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} : \quad X_{mm}^{(k)}(S) &\approx \sum_n S \cdot \underbrace{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S}_{O(1)} X_{nm}^{(k-1)}(S) \\ \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} : \quad X_{mq}^{(k)}(S) &= \frac{1}{\lambda} \sum_n \underbrace{\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_S}{-i\dot{\gamma}_{qm}(S)}}_{O(1)} X_{nq}^{(k-1)}(S) \quad (q \neq m), \end{aligned} \quad (3.53)$$

Si on observe attentivement, on voit que le deuxième indice (l'indice de la colonne) des matrices $X(S)$ est le même de chaque côté de l'égalité. Cela devrait nous faire penser à un produit matriciel. Par contre, étant donné qu'on a deux relations : une pour $X_{mm}^{(k)}(S)$ et une pour $X_{mq}^{(k)}(S)$ (pour $q \neq m$), il semble que la matrice qui multiplie $X^{(k-1)}(S)$ dépende de la colonne de $X^{(k)}(S)$. Autrement dit, on pourra écrire (3.53) comme un produit matriciel un peu spécial :

$$X_{mp}^{(k)}(S) = \sum_n C_{mn}^p(S) X_{np}^{(k-1)}(S) \quad (k > 1), \quad (3.54)$$

Si on revient aux relations (3.52), on peut déduire que :

$$X^{(1)}(S) \sim \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & 0 & \dots & \dots \\ \lambda^{-1} & 0 & \lambda^{-1} & \dots & \dots \\ \lambda^{-1} & \dots & \dots & \lambda^{-1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.56)$$

On possède maintenant tout ce qu'il faut pour calculer $X^{(k>1)}(S)$ sous les conditions $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \gg 1$ car, de (3.54), on trouve :

$$X_{mp}^{(k)}(S) = \sum_n (C_{mn}^p(S))^{k-1} X_{np}^{(1)}(S) \quad (k > 1). \quad (3.57)$$

Voyons maintenant si ça marche. On a calculé plus tôt $A^{(1)}(S)$, $A^{(2)}(S)$ et $A^{(3)}(S)$ (voir (3.21) à (3.29)). Si on prend (3.56) pour calculer $A^{(1)}(S)$ selon la définition (3.30) on obtient :

$$\begin{aligned} A_{m \neq 0}^{(1)}(S) &\sim \frac{1}{\lambda} + \frac{e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)}}{\lambda} \\ A_0^{(1)}(S) &= 0, \end{aligned} \quad (3.58)$$

qui concorde avec (3.21) pour l'ordre de grandeur (on a gardé dans C^p que l'ordre de grandeur des termes). Maintenant, on peut utiliser notre relation (3.57) pour

calculer $X^{(2)}(S)$:

$$\begin{aligned}
 X^{(2)}(S) &\sim \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \dots & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \dots \\ \lambda^{-1} & 0 & \lambda^{-1} & \dots & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \dots \\ \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & 0 & \dots & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \dots \\ S & S & S & S & 0 & S & \dots \\ \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}}_{C^p} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \lambda^{-1} & \lambda^{-1} & 0 & \dots \\ \lambda^{-1} & 0 & \lambda^{-1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \lambda^{-1} \end{pmatrix}}_{X^{(1)}(S)} \\
 X^{(2)}(S) &\sim \begin{pmatrix} S\lambda^{-1} & \lambda^{-2} & \lambda^{-2} & \dots \\ \lambda^{-2} & 0 & \lambda^{-2} & \dots \\ \lambda^{-2} & \lambda^{-2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.59}
 \end{aligned}$$

Si on calcule ensuite $A^{(2)}(S)$ à partir de ceci, on obtient :

$$\begin{aligned}
 A_0^{(2)}(S) &\sim \frac{S}{\lambda} + \sum_{n \neq 0} \frac{e^{-i\lambda\gamma_{n0}(S)}}{\lambda^2} \\
 A_{m \neq 0}^{(2)}(S) &\sim \sum_{n \neq m} \frac{e^{-i\lambda\gamma_{n0}(S)}}{\lambda^2}. \tag{3.60}
 \end{aligned}$$

Ici, il manque un terme proportionnel à $e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)}$ dans $A_{m \neq 0}^{(2)}(S)$ pour qu'il y ait concordance parfaite avec ce qu'on avait déjà calculé (voir (3.23)). Ceci est dû au fait qu'on a négligé un terme $\sim X^{(k-1)}(0)$ dans notre relation de récurrence. Par contre, ce qui est important ici, c'est l'ordre de grandeur des termes dominants ; et ceci est bien reflété par notre analyse (le terme manquant n'étant pas un terme dominant). On peut arriver à la même conclusion pour $A^{(3)}(S)$.

Maintenant, on peut se demander quelque chose. Est-il possible de trouver une

formule générale pour l'ordre de grandeur de $X^{(k)}(S)$? La réponse est : oui ! Si on prend la relation (3.57), il est difficile de la trouver. Par contre, si on observe $(C^p)^2$, il sera facile de l'observer :

$$(C^p)^2 = C^p \cdot C^p \sim \begin{array}{c} \begin{array}{c} \xrightarrow{p} \\ \downarrow p \end{array} \left(\begin{array}{cccccccc} S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & \dots & \lambda^{-2} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} \\ S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & \dots & \lambda^{-2} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} \\ S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & \dots & \lambda^{-2} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} \\ \dots & \dots \\ S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \lambda^{-2} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} \\ \dots & S\lambda^{-1} \\ S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & S\lambda^{-1} & \dots & \lambda^{-2} & S\lambda^{-1} & \dots & S\lambda^{-1} \end{array} \right) \end{array} \quad (3.61)$$

où on a gardé que le terme dominant pour chaque élément de la matrice. En observant cette matrice, on peut observer une chose en particulier que C^p n'avait pas : la p -ième ligne est une ligne uniquement composée de termes $\sim O(S/\lambda)$, qui est le terme dominant de la matrice $(C^p)^2$. Qu'est-ce que cela nous indique ? Cela nous indique qu'il est **certain** que le ou les éléments dominants de $X^{(k-2)}(S)$ seront multipliés par un facteur S/λ dans :

$$X_{mp}^{(k)}(S) = \sum_n (C_{mn}^p(S))^2 X_{np}^{(k-2)}(S) \quad (k > 2), \quad (3.62)$$

(sauf si $(C^p)^2$ multiplie un $X^{(k-2)}$ complètement nul, mais il n'y aura pas de tel $X^{(k-2)}$). Autrement dit, on gagne un facteur S/λ à tous les deux ordres et on peut donc dire, connaissant l'ordre de grandeur des $X^{(0)}(S)$ et $X^{(1)}(S)$ dominants (voir les équations (3.50) et (3.52)), que :

$$X^{(k)}(S) \sim \left(\frac{S}{\lambda}\right)^{\frac{k}{2}} \quad (\text{pour } k \text{ pair})$$

$$X^{(k)}(S) \sim \frac{1}{\lambda} \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{\frac{k-1}{2}} \quad (\text{pour } k \text{ impair}). \quad (3.63)$$

Étant donné qu'on connaît la relation entre les $A^{(k)}(S)$ et les $X^{(k)}(S)$ (voir l'équation (3.30)), on peut donc affirmer, finalement, que :

$$\begin{aligned} A^{(k)}(S) &\sim \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{\frac{k}{2}} && (\text{pour } k \text{ pair}) \\ A^{(k)}(S) &\sim \frac{1}{\lambda} \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{\frac{k-1}{2}} && (\text{pour } k \text{ impair}). \end{aligned} \quad (3.64)$$

On voit avec ces relations que, tout dépendant de la valeur de S (qui représente, en termes de variables sans dimension, la durée de l'intervalle de temps considéré), il est possible qu'un $A^{(k>0)}(S)$ soit de l'ordre de l'unité (i.e de l'ordre de grandeur de $A^{(0)}(S)$). Dans ce cas la série ne converge plus et il y a une probabilité significative que l'état du système ait subi une transition. *Le temps de durée de l'expérience joue donc un rôle sur la probabilité de transition du système* et comme l'approximation adiabatique peut s'écrire comme suit :

$$|\psi(S)\rangle \approx |\psi(S)\rangle^{(0)} = e^{-i\lambda \int_0^S ds \epsilon_0(s)} |0(S)\rangle, \quad (3.65)$$

alors *l'approximation adiabatique n'est pas valide pour tout temps.*

Plus précisément, sachant que $A^{(2)}(S) \sim S/\lambda$, alors $A^{(2)}(S) \sim 1$ pour $S \sim \lambda$. En termes de variables avec dimensions, après un temps $T \sim E\tau^2$, il y a une probabilité significative que le système ait fait une transition ; et donc l'approximation adiabatique **n'est plus valide**.

Par ailleurs, le *temps de dépeuplement* de l'état initial est $T_{ad} \sim E\tau^2$ pour un cas adiabatique ($\lambda \gg 1$). On se rappelle qu'on avait déterminé au début du chapitre que le temps de dépeuplement de l'état initial pour le cas non-adiabatique ($\lambda \sim 1$) était de $T_{n.-ad} \sim \tau$ (voir équation (3.10)). On trouve donc la relation $T_{ad} \sim E\tau \cdot T_{n.-ad} = \lambda T_{n.-ad}$. Dans la limite d'un λ grand, (pour un cas adiabatique), le temps de dépeuplement est beaucoup plus long que pour un cas non-adiabatique ;

ce qui va dans le sens (i.e respecte l'idée) de l'approximation adiabatique.

3.4 En résumé

Si nous résumons ce que nous avons vu dans ce chapitre (chapitre central de ce mémoire), nous avons vu que pour certains Hamiltoniens dits *génériques*, nous avons pu trouver, (en considérant de façon indépendante la durée de l'intervalle de temps considéré $[0, T]$), l'ordre de grandeur des termes de la série présentée au chapitre précédent; et ce à n'importe quel ordre. Une chose que nous avons réalisé est que le temps de durée de l'expérience a une influence sur la grandeur des termes de la série, et donc sur la probabilité de transition du système. L'approximation adiabatique n'est donc pas valide pour tout temps. Pour un Hamiltonien donné qui respecte l'idée d'une évolution lente ($\lambda \gg 1$), le système finira tout de même (si on attend assez longtemps) par effectuer une transition dans le spectre. Par contre, nous avons trouvé que plus le système évolue lentement, plus le système restera longtemps dans l'état associé à l'état initial par rapport au spectre, et cela respecte l'idée que nous avons de l'approximation adiabatique.

CHAPITRE 4

CAS CONCRET DU *SPIN*-1/2 DANS UN CHAMP MAGNÉTIQUE

Dans ce chapitre, nous étudierons un exemple concret de système et nous essayerons de vérifier les conclusions trouvées au chapitre précédent. Le système que nous étudierons est, encore une fois, une particule de *spin*-1/2 dans un champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe. Nous avons déjà introduit ce système au premier chapitre au moment de la discussion sur la validité du critère "standard" pour vérifier la lenteur de l'évolution d'un système. Nous ramenons cet exemple encore une fois car c'est un système assez simple et un des seuls systèmes dépendant du temps qui peut se résoudre exactement.

4.1 Présentation du système : un rappel

Le Hamiltonien du système s'écrit, pour un champ magnétique de grandeur constante, comme :

$$\hat{H}(t) = -\frac{\omega_0}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{v}(t), \quad (4.1)$$

où ω_0 est une constante, $\vec{\sigma}$ est un vecteur contenant les matrices de Pauli et $\vec{v}(t)$ un vecteur unitaire pointant dans la direction du champ magnétique. Sans perdre de généralité, on peut définir le vecteur $\vec{v}(t)$ comme étant :

$$\vec{v}(t) = (\sin \theta \cos \omega t, \sin \theta \sin \omega t, \cos \theta), \quad (4.2)$$

qui correspond à un champ magnétique incliné d'un angle θ par rapport à l'axe z , tournant autour de l'axe z à fréquence ω et qui est initialement dans le plan xOz (voir la figure 4.1).

Ce système possède deux états propres :

$$|-(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \quad \leftrightarrow \quad E_-(t) = -\frac{\omega_0}{2}$$

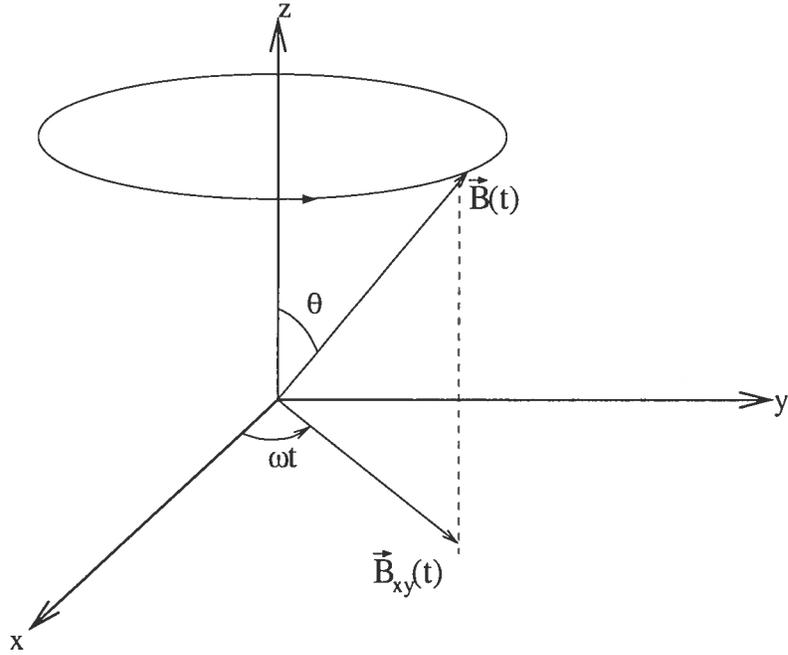


FIG. 4.1 – Champ magnétique homogène tournant autour d'un axe fixe. Initialement, le champ magnétique est dans le plan xOy (pour $\theta \neq 0$).

$$|+(t)\rangle = -e^{-i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \leftrightarrow E_+(t) = +\frac{\omega_0}{2}. \quad (4.3)$$

Comme dit plus tôt, nous pouvons résoudre exactement l'équation de Schrödinger pour trouver l'opérateur d'évolution du système (voir (1.22) à (1.27) pour la démarche complète) :

$$\hat{U}(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} e^{i\frac{\varpi t}{2}[\sigma_z \cos \beta + \sigma_x \sin \beta]}, \quad (4.4)$$

où $\varpi \cos \beta \equiv (\omega_0 \cos \theta + \omega)$, $\varpi \sin \beta \equiv \omega_0 \sin \theta$ et $\varpi \equiv \sqrt{\omega_0^2 + 2\omega_0\omega \cos \theta + \omega^2}$.

4.2 Calcul des $A^{(k)}(S)$

La première chose à faire avant de commencer le calcul explicite des $A^{(k)}(S)$ est de passer aux quantités sans dimension. L'échelle de temps caractéristique de changement du Hamiltonien est $\tau = \omega^{-1}$ et l'énergie caractéristique est $E = \omega_0$.

En définissant :

$$s \equiv (t/\tau) = \omega t, \quad (4.5)$$

on obtient :

$$\begin{aligned} |\hat{-}(s)\rangle &= e^{-i\frac{s}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{s}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \quad \leftrightarrow \quad \epsilon_-(s) = \hat{E}_-(s)/E = -\frac{1}{2} \\ |\hat{+}(s)\rangle &= -e^{-i\frac{s}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{s}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \quad \leftrightarrow \quad \epsilon_+(s) = \hat{E}_+(s)/E = +\frac{1}{2}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

et on laissera tomber les "chapeaux" sur les états pour alléger l'écriture. On peut maintenant ajouter une phase globale $e^{i\alpha_{\pm}(s)}$ à nos états propres qui nous permettra d'imposer :

$$\langle m'(s) | m(s) \rangle = 0 \quad \forall s, \quad m = \pm. \quad (4.7)$$

L'équation (4.7) nous permet de trouver que $\alpha_{\pm}(s) = \mp \frac{\cos \theta}{2} s$, et on peut redéfinir nos états comme :

$$\begin{aligned} |-(s)\rangle &= e^{i\frac{\cos \theta}{2} s} \left(e^{-i\frac{s}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{s}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \right) \\ |+(s)\rangle &= e^{-i\frac{\cos \theta}{2} s} \left(-e^{-i\frac{s}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |+\rangle_z + e^{i\frac{s}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle_z \right). \end{aligned} \quad (4.8)$$

On peut également calculer les quantités :

$$\begin{aligned} \langle -'(s) | + (s) \rangle &= e^{-i(\cos \theta) s} \left(-i \frac{\sin \theta}{2} \right) \\ \langle +'(s) | - (s) \rangle &= e^{+i(\cos \theta) s} \left(-i \frac{\sin \theta}{2} \right), \end{aligned} \quad (4.9)$$

qui reviendront souvent dans le calcul des $A^{(k)}(S)$.

Pour un état initial $|\psi(0)\rangle = |+(0)\rangle$, on peut maintenant calculer les $A^{(k)}(S)$. En se référant à l'équation (3.16), on déduit que $A_m^{(0)}(S) = \delta_{m+}$. Avec ceci et la

relation de récurrence (3.15), on peut calculer $A_m^{(1)}(S)$:

$$\begin{aligned} A_+^{(1)}(S) &= 0 \\ A_-^{(1)}(S) &= e^{-i\lambda\gamma_{-+}(S)} \underbrace{\int_0^S ds_1 e^{+i\lambda\gamma_{-+}(s_1)} \langle -' | + \rangle_{s_1}}_{I_1}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

avec $\gamma_{-+}(s) = \int_0^s ds' (\epsilon_-(s') - \epsilon_+(s')) = -s$ et $\lambda \equiv E\tau = \frac{\omega_0}{\omega}$. On peut maintenant calculer l'intégrale I_1 :

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^S ds_1 e^{-i(\lambda + \cos \theta)s_1} \left(-i \frac{\sin \theta}{2} \right) \\ &= \frac{\frac{\sin \theta}{2}}{(\lambda + \cos \theta)} \left(e^{-i(\lambda + \cos \theta)S} - 1 \right). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Une particularité du système de $spin-1/2$ dans un champ magnétique est qu'on peut résoudre les intégrales exactement dans les $A_m^{(k)}(S)$. Quand on avait calculé $A_m^{(1)}(S)$ dans un cadre général au dernier chapitre, on avait dû approximer l'intégrale (voir (3.20)) sous les conditions $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \gg 1$. On peut montrer que, dans la limite d'un λ grand, l'intégrale exacte et l'approximation tendent vers la même valeur. L'approximation de l'intégrale trouvée au dernier chapitre était :

$$\begin{aligned} I_{approx.} &\approx e^{+i\lambda\gamma_{-+}(S)} \frac{\langle -' | + \rangle_S}{i\lambda\dot{\gamma}_{-+}(S)} - \frac{\langle -' | + \rangle_0}{i\lambda\dot{\gamma}_{-+}(0)} \\ &= \frac{\frac{\sin \theta}{2}}{\lambda} \left(e^{-i(\lambda + \cos \theta)S} - 1 \right). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Mais, comme on peut développer le facteur $(\lambda + \cos \theta)^{-1}$ comme ceci :

$$(\lambda + \cos \theta)^{-1} = \lambda^{-1} \left(1 + \frac{\cos \theta}{\lambda} \right)^{-1} = \lambda^{-1} \left(1 - \frac{\cos \theta}{\lambda} + O(1/\lambda^2) + \dots \right), \quad (4.13)$$

dans la limite d'un λ grand, $(\lambda + \cos \theta)^{-1} \approx \lambda^{-1}$ et donc $I_1 \approx I_{approx.}$

Bref, avec l'expression de I_1 trouvée, on trouve que :

$$A_+^{(1)}(S) = 0$$

$$A_-^{(1)}(S) = \frac{\frac{\sin \theta}{2}}{(\lambda + \cos \theta)} \left(e^{-i(\cos \theta)S} - e^{+i\lambda S} \right). \quad (4.14)$$

On peut maintenant utiliser la relation de récurrence entre les $A^{(k)}(S)$ (voir l'équation (3.15)) pour calculer les $A^{(k>1)}(S)$:

$$\begin{aligned} A_+^{(2)}(S) &= \frac{-i \left(\frac{\sin \theta}{2} \right)^2}{(\lambda + \cos \theta)} \cdot S + \frac{\left(\frac{\sin \theta}{2} \right)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2} (e^{i(\lambda + \cos \theta)S} - 1) \\ A_-^{(2)}(S) &= 0 \\ A_+^{(3)}(S) &= 0 \\ A_-^{(3)}(S) &= -i \frac{\left(\frac{\sin \theta}{2} \right)^3}{(\lambda + \cos \theta)^2} \cdot S (e^{-i(\cos \theta)S} - e^{i\lambda S}) + 2 \frac{\left(\frac{\sin \theta}{2} \right)^3}{(\lambda + \cos \theta)^3} (e^{i\lambda S} - e^{-i(\cos \theta)S}) \\ &\dots \end{aligned} \quad (4.15)$$

Notre analyse du chapitre dernier nous indique que les termes dominants des $A^{(k)}(S)$ sont de l'ordre de grandeur :

$$\begin{aligned} A^{(k)}(S) &\sim \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{\frac{k}{2}} && \text{(pour } k \text{ pair)} \\ A^{(k)}(S) &\sim \frac{1}{\lambda} \left(\frac{S}{\lambda} \right)^{\frac{k-1}{2}} && \text{(pour } k \text{ impair).} \end{aligned} \quad (4.16)$$

En regardant (4.14) et (4.15), on voit que nous avons calculé que $A^{(0)}(S) \sim 1$, $A^{(1)}(S) \sim 1/\lambda$, $A^{(2)}(S) \sim S/\lambda$ et $A^{(3)}(S) \sim S/\lambda^2$ qui concordent avec l'équation (4.16). Ici, comme on a commencé dans un état $|\psi(0)\rangle = |+(0)\rangle$ et qu'on étudie un système qui n'a que deux niveaux, il faudra attendre un temps (sans dimension) de l'ordre de $S \sim \lambda^2 = (\omega_0/\omega)^2$ (voir $A_-^{(3)}(S)$ dans (4.15)) pour qu'il y ait *dépeuplement* de l'état initial. (Bien sûr, comme le système évolue lentement $\omega_0/\omega \gg 1$.)

4.3 Vérification à partir de l'état exact

Mais, peut-être la chose la plus intéressante ici, est que l'équation de Schrödinger pour notre système se résout exactement. En observant l'état exact, on devrait

être en mesure de retrouver les expressions des $A^{(k)}(S)$ calculés plus tôt; et ceci confirmerait que notre analyse est correcte.

Pour vérifier cela, on peut commencer par réécrire l'opérateur d'évolution du système en termes de quantités sans dimension :

$$\begin{aligned}\hat{U}(s) &= e^{-i\frac{s}{2}\sigma_z} e^{i\frac{xs}{2}[\sigma_z \cos \beta + \sigma_x \sin \beta]} \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i\frac{s}{2}} \left[\cos\left(\frac{xs}{2}\right) + i\frac{(\lambda \cos \theta + 1)}{x} \sin\left(\frac{xs}{2}\right) \right] & ie^{-i\frac{s}{2}} \left(\frac{\lambda \sin \theta}{x} \right) \sin\left(\frac{xs}{2}\right) \\ ie^{+i\frac{s}{2}} \left(\frac{\lambda \sin \theta}{x} \right) \sin\left(\frac{xs}{2}\right) & e^{+i\frac{s}{2}} \left[\cos\left(\frac{xs}{2}\right) - i\frac{(\lambda \cos \theta + 1)}{x} \sin\left(\frac{xs}{2}\right) \right] \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (4.17)$$

dans la base des états propres de σ_z ; et où $\cos \beta \equiv \frac{(\lambda \cos \theta + 1)}{x}$, $\sin \beta \equiv \frac{\lambda \sin \theta}{x}$ et $x \equiv \sqrt{\lambda^2 + 2\lambda \cos \theta + 1}$.

On peut maintenant trouver l'état $|\psi(S)\rangle = \hat{U}(S)|\psi(0)\rangle$ (dans la base $|\pm(S)\rangle$) pour un état initial $|\psi(0)\rangle = |+(0)\rangle$:

$$\begin{aligned}|\psi(S)\rangle &= e^{i\left(\frac{\cos \theta}{2}\right)S} \left(\cos\left(\frac{xS}{2}\right) - i\frac{(\lambda + \cos \theta)}{x} \sin\left(\frac{xS}{2}\right) \right) |+(S)\rangle \\ &\quad + e^{-i\left(\frac{\cos \theta}{2}\right)S} \left(\frac{-i \sin \theta}{x} \sin\left(\frac{xS}{2}\right) \right) |-(S)\rangle.\end{aligned}\quad (4.18)$$

Sachant que $\cos \beta = \frac{e^{i\beta} + e^{-i\beta}}{2}$ et $\sin \beta = \frac{e^{i\beta} - e^{-i\beta}}{2i}$, on peut réécrire notre état comme :

$$\begin{aligned}|\psi(S)\rangle &= \frac{e^{i\left(\frac{\cos \theta}{2}\right)S}}{2} \left[\left(1 - \frac{(\lambda + \cos \theta)}{x} \right) e^{i\frac{xS}{2}} + \left(1 + \frac{(\lambda + \cos \theta)}{x} \right) e^{-i\frac{xS}{2}} \right] |+(S)\rangle \\ &\quad + \frac{e^{-i\left(\frac{\cos \theta}{2}\right)S}}{2} \left(\frac{\sin \theta}{x} \right) \left[e^{-i\frac{xS}{2}} - e^{i\frac{xS}{2}} \right] |-(S)\rangle.\end{aligned}\quad (4.19)$$

Maintenant, nous réécrivons certaines expressions comme des séries de Taylor, mais en gardant tous les termes :

$$x \equiv \sqrt{\lambda^2 + 2\lambda \cos \theta + 1} = \sqrt{(\lambda + \cos \theta)^2 + (\sin \theta)^2} = (\lambda + \cos \theta) \sqrt{1 + \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2}}$$

$$\begin{aligned}
&= (\lambda + \cos \theta) \underbrace{\left(1 + \frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^4} + \dots \right)}_{\sqrt{1 + \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2}}} \\
\frac{1}{x} &= \frac{1}{(\lambda + \cos \theta)} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2} + \frac{-1}{2} \left(\frac{-3}{2} \right) \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^4} + \dots \right). \quad (4.20)
\end{aligned}$$

Nous réécrivons également les exponentielles comme des série de Taylor en gardant tous les termes :

$$\begin{aligned}
e^{\pm i \frac{\pi S}{2}} &= \exp \left\{ \pm \frac{iS}{2} (\lambda + \cos \theta) \underbrace{\left[1 + \frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^4} + \dots \right]}_x \right\} \\
&= e^{\pm i \frac{(\lambda + \cos \theta) S}{2}} \exp \left\{ \pm \frac{iS}{2} \underbrace{\left[\frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right]}_{\Delta_{\pm}} \right\}, \quad (4.21)
\end{aligned}$$

et on développe $e^{\Delta_{\pm}}$ en série de Taylor en gardant tous les termes :

$$\begin{aligned}
e^{\Delta_{\pm}} &= 1 + \underbrace{\left\{ \pm \frac{iS}{2} \left[\frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right] \right\}}_{\Delta_{\pm}} \\
&+ \frac{1}{2!} \underbrace{\left\{ \pm \frac{iS}{2} \left[\frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} + \frac{1}{2} \left(\frac{-1}{2} \right) \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right] \right\}^2}_{\Delta_{\pm}^2} + \dots \quad (4.22)
\end{aligned}$$

Si on observe l'équation (4.21), on voit que de $e^{\pm i \frac{\pi S}{2}}$ sort un facteur $e^{\pm i \frac{\lambda S}{2}}$. Ceci nous indique donc qu'on peut réécrire notre état (équation (4.19)) comme :

$$|\psi(S)\rangle = \left(M_{+-} e^{+i \frac{\lambda S}{2}} + M_{++} e^{-i \frac{\lambda S}{2}} \right) |+(S)\rangle + \left(M_{--} e^{+i \frac{\lambda S}{2}} + M_{-+} e^{-i \frac{\lambda S}{2}} \right) |- (S)\rangle, \quad (4.23)$$

où on fait l'identification :

$$\begin{aligned}
 M_{+-} &= \sum_k X_{+-}^{(k)}(S) \\
 M_{++} &= \sum_k X_{++}^{(k)}(S) \\
 M_{-+} &= \sum_k X_{-+}^{(k)}(S) \\
 M_{--} &= \sum_k X_{--}^{(k)}(S),
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

en termes de notation déjà connue. Ayant déjà calculé les $A_m^{(k)}(S)$ pour notre système à la section précédente, on peut donc identifier les $X_{mp}^{(k)}(S)$ et comparer avec ce que l'état exact nous dit (en (4.24)).

À l'aide de (4.19), (4.20), (4.21) et (4.22), on arrive à identifier que le coefficient devant $e^{i\frac{\lambda S}{2}} |+(S)\rangle$ dans $|\psi(S)\rangle$ est :

$$\sum_k X_{+-}^{(k)}(S) = \frac{e^{i(\cos \theta)S}}{2} \cdot \underbrace{\left(\frac{1}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2} - \frac{3}{8} \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^4} + \dots \right)}_{\left(1 - \frac{(\lambda + \cos \theta)}{x}\right)} \cdot e^{\Delta_+} \tag{4.25}$$

où

$$e^{\Delta_+} = \left(1 + \left\{ \frac{iS}{2} \left[\frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} - \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right] \right\} + \frac{\left\{ \frac{iS}{2} \left[\frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} - \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right] \right\}^2}{2!} + \dots \right)$$

Maintenant, si on veut comparer ce que l'état exact nous dit avec ce que nous avons déjà calculé, il faut trouver un moyen de savoir quels termes appartiennent à quel ordre dans les M_{mp} (équation (4.25) par exemple). Identifier quels termes appartiennent à quel ordre dans (4.25) peut sembler impossible à première vue. En fait, il y a un moyen de le savoir. Il existe une signature (ou encore une trace) de l'ordre auquel appartient chaque terme de (4.25). Pour voir cela, on doit observer les $A_m^{(k)}(S)$ calculés à la section précédente. Si on observe les équations (4.14) et (4.15),

on voit qu'on a un facteur "sin θ " a une certaine puissance aux numérateurs. De plus, il semble que (pour un $A_m^{(k)}(S)$ non-nul), $A_m^{(k)}(S)$ soit proportionnel à $(\sin \theta)^k$. Ceci n'est pas un hasard. Ceci est dû au fait que $A_m^{(k)}(S)$ contient k facteurs de type $\langle m' | n \rangle$, lesquels contiennent chacun un facteur $\sin \theta$ (voir l'équation (4.9)). Et ces facteurs, ($\langle m' | n \rangle$), sont les **seules sources** de facteurs "sin θ " aux numérateurs de nos $A_m^{(k)}(S)$ (les intégrales de type $\int_0^S ds_1 e^{-i(\lambda + \cos \theta)s_1}$ ne peuvent que donner des facteurs $(\lambda + \cos \theta)$ aux **dénominateurs**). Donc, pour savoir quel est le terme dominant d'un $X_{mp}^{(k)}(S)$ (selon l'état exact $|\psi(S)\rangle$), il s'agira de comparer les termes proportionnels à $(\sin \theta)^k$ dans $M_{mp} = \sum_k X_{mp}^{(k)}(S)$ et de déterminer quel est le terme dominant. Autrement dit, la puissance du facteur "sin θ " de chaque terme constitue une signature quant à l'ordre auquel appartiennent ces termes.

Si on regarde l'équation (4.25), on voit qu'on peut seulement avoir des puissances paires du facteur "sin θ " dans les numérateurs. Ceci est bien, car comme notre système n'a que deux niveaux et qu'on commence dans un état initial $|\psi(0)\rangle = |+(0)\rangle$, alors $A_+^{(k \text{ impair})}(S) = 0$ qui correspond aux processus ayant un nombre de transitions impair. De plus, on voit qu'il n'y a pas de terme proportionnel à $(\sin \theta)^0 = 1$, qui concorde avec le fait que $X_{mp}^{(0)}(S) = \delta_{m+} \delta_{p+}$ (voir équation (3.50)). Pour le reste, avec (4.25), on peut trouver que le terme dominant au deuxième ordre est :

$$\text{pour } (\sin \theta)^2 : \quad X_{+-}^{(2)}(S) = \frac{e^{i(\cos \theta)S}}{4} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2}, \quad (4.26)$$

qui correspond bien avec ce que nous avons déjà calculé (voir le coefficient de $e^{i\lambda S}$ dans $A_+^{(2)}(S)$; (4.15)). On peut faire de même pour les autres M_{mp} . Par exemple, selon (4.19), (4.20), (4.21) et (4.22) :

$$\sum_k X_{++}^{(k)}(S) = \cdot \underbrace{\left(1 - \frac{1}{4} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)^2} + \frac{3}{16} \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^4} - \dots\right)}_{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{(\lambda + \cos \theta)}{x}\right)} \cdot e^{\Delta_-} \quad (4.27)$$

où

$$e^{\Delta_-} = \left(1 + \left\{ \frac{-iS}{2} \left[\frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} - \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right] \right\} + \frac{\left\{ \frac{-iS}{2} \left[\frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)} - \frac{(\sin \theta)^4}{(\lambda + \cos \theta)^3} + \dots \right] \right\}^2}{2!} + \dots \right)$$

et on trouve que les termes dominants pour les quelques premiers ordres sont :

$$\begin{aligned} \text{pour } (\sin \theta)^0 : \quad X_{++}^{(0)}(S) &= 1, \\ \text{pour } (\sin \theta)^1 : \quad X_{++}^{(0)}(S) &= 0, \\ \text{pour } (\sin \theta)^2 : \quad X_{++}^{(2)}(S) &= \frac{-iS}{4} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)}, \\ \text{pour } (\sin \theta)^3 : \quad X_{++}^{(3)}(S) &= 0, \end{aligned} \quad (4.28)$$

qui correspondent bien avec ce que nous avons calculé (voir entre autres le terme sans exponentielle de $A_+^{(2)}(S)$ dans (4.15)).

Également, si on considère (4.25) et (4.27) ensemble, on peut essayer de trouver quel est le terme dominant pour une puissance de "sin θ " donnée ; ce qui correspond à l'ordre de grandeur de $A_+^{(k \text{ pair})}(S)$ à un ordre quelconque. En observant bien, on arrive à déterminer que le terme dominant appartient à $\sum_k X_{++}^{(k)}(S)$ dans (4.27). Il s'agit du "1" de " $\frac{1}{2} \left(1 + \frac{(\lambda + \cos \theta)}{x}\right)$ " (dans (4.27)) qui multiplie le terme d'ordre le plus bas de $\frac{\Delta_-^j}{j!}$ dans la série de Taylor de e^{Δ_-} . Pour chaque $\frac{\Delta_-^j}{j!}$ (i.e. pour chaque valeur de j), on aura le terme d'ordre le plus bas (i.e ayant le facteur sin θ à la

puissance la plus petite possible) :

$$\text{terme d'ordre le plus bas dans } \frac{\Delta^j}{j!} = \frac{\left(\frac{-iS}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)}\right)^j}{j!} \quad j = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.29)$$

qui nous renseigne sur l'ordre de grandeur de $A_+^{(k \text{ pair})}(S)$:

$$\begin{aligned} A_+^{(k \text{ pair}=2j)}(S) &= \frac{\left(\frac{-iS}{2} \frac{(\sin \theta)^2}{(\lambda + \cos \theta)}\right)^j}{j!} \\ &\sim \left(\frac{S}{\lambda}\right)^j = \left(\frac{S}{\lambda}\right)^{\frac{k}{2}} \quad \text{pour } k \text{ pair.} \end{aligned} \quad (4.30)$$

Ceci est bien en accord avec les conclusions trouvées au chapitre précédent pour le cas k pair (voir l'équation (4.16)).

On peut faire la même démarche pour le cas k impair ; c'est-à-dire identifier $M_{-+} = \sum_k X_{-+}^{(k)}(S)$ et $M_{--} = \sum_k X_{--}^{(k)}(S)$ dans l'état exact et vérifier le terme dominant pour une classe de termes proportionnels à $(\sin \theta)^k$. On trouve, là aussi, que les $A_-^{(k)}(S)$ calculés à la section précédente sont justes et que les conclusions tirées au chapitre précédent sont validées.

4.4 Un point délicat

Une dernière chose qu'on peut vérifier est la suivante. Au dernier chapitre, à la section 3.3.2, lors de la dérivation de l'équation (3.47), il y avait une étape un peu moins rigoureuse où l'on égalisait les coefficients d'exponentielles imaginaires de type $e^{-i\lambda\gamma(S)}$ de chaque côté de l'équation dans la limite de petites valeurs de S . Comme dans ce cas les différentes exponentielles imaginaires n'ont pas le temps de se distinguer les unes des autres, il n'est pas clair que les coefficients d'une exponentielle donnée de chaque côté de l'équation soient égaux. Par contre, ici, nous avons calculé les $A^{(k)}(S)$ pour les quelques premiers ordres, et il est donc possible de regarder ce qu'il en est.

Nous avons, au chapitre précédent, la relation (voir l'équation (3.45)) :

$$\begin{aligned} \sum_p X_{mp}^{(k)}(S) e^{-i\lambda\gamma_{p0}(S)} \approx & \\ & \frac{1}{\lambda} \sum_n \sum_{q \neq m} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} \\ & + \sum_n \left(\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nm}^{(k-1)}(0) \cdot S + \frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

sous les conditions $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \ll 1$; et nous égalisons les coefficients d'une exponentielle donnée pour obtenir :

$$\begin{aligned} \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{m0}(S)} : \quad X_{mm}^{(k)}(S) &= \sum_{n \neq m} \left(\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nm}^{(k-1)}(0) \cdot S + \frac{1}{\lambda} \sum_{q \neq m} \frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \\ \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{q0}(S)} : \quad X_{mq}^{(k)}(S) &= \frac{1}{\lambda} \sum_{n \neq m} \left(\frac{\langle \hat{m}' | \hat{n} \rangle_0 X_{nq}^{(k-1)}(0)}{-i\dot{\gamma}_{qm}(0)} \right) \quad (q \neq m). \end{aligned} \quad (4.32)$$

Appliquées à notre système concret, on obtient, pour $k = 1$:

$$\begin{aligned} \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{++}(S)} : \quad X_{++}^{(1)}(S) &= \left(-i \frac{\sin \theta}{2} \right) \left(\underbrace{X_{-+}^{(0)}(0)}_0 \cdot S + \frac{i}{\lambda} \underbrace{X_{--}^{(0)}(0)}_0 \right) = 0 \\ \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{-+}(S)} : \quad X_{--}^{(1)}(S) &= \left(-i \frac{\sin \theta}{2} \right) \left(\underbrace{X_{+-}^{(0)}(0)}_0 \cdot S - \frac{i}{\lambda} \underbrace{X_{++}^{(0)}(0)}_1 \right) = \left(\frac{-\sin \theta}{2\lambda} \right) \\ \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{-+}(S)} : \quad X_{+-}^{(1)}(S) &= \frac{-i}{\lambda} \left(-i \frac{\sin \theta}{2} \right) \underbrace{X_{--}^{(0)}(0)}_0 = 0 \\ \text{pour } e^{-i\lambda\gamma_{++}(S)} : \quad X_{-+}^{(1)}(S) &= \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\sin \theta}{2} \right) \underbrace{X_{++}^{(0)}(0)}_1 = \left(\frac{\sin \theta}{2\lambda} \right). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Si on observe (4.14) (qui est un calcul exact) sous les conditions $\lambda \gg 1$ et $\lambda S \ll 1$, on trouve que $(\lambda + \cos \theta)^{-1} \approx \lambda^{-1}$ et $e^{-i(\cos \theta)S} \approx 1$; et donc que la relation de récurrence (4.32) est effectivement satisfaite. On peut également vérifier que les cas $k = 2$ et $k = 3$ satisfassent également la relation de récurrence (pour des temps très petits). (Par ailleurs, pour le cas $k = 3$, on trouve un facteur multiplicatif

(= 2) de différence. Ceci est dû au fait que (4.31) est en fait une approximation.)

On peut maintenant se demander si le fait que la relation (4.32) soit satisfaite par notre système est une particularité de notre système ou est-ce le cas pour tout système ? Est-ce qu'on arriverait à des conclusions différentes pour des systèmes qui ne respecteraient pas l'équation (4.32) (s'il en existe) ? Ces questions sont intéressantes et nécessiteraient une étude plus approfondie. Nous les laisserons ouvertes dans ce mémoire en étant conscient qu'un certain point délicat reste à vérifier.

CONCLUSION

Permettons-nous, afin de conclure ce mémoire, de résumer ce que nous avons vu.

Nous avons commencé par présenter un portrait de l'approximation adiabatique, dont une dérivation du critère "standard" pour vérifier le degré d'adiabaticité du système sous étude ; information capitale pour savoir si on peut utiliser l'approximation adiabatique pour estimer l'état du système. Ceci nous a ensuite amené à commenter une controverse récente entourant le critère "standard" et la validité de l'approximation adiabatique. Le critère "standard" nous indique si on peut utiliser l'approximation adiabatique pour estimer l'état d'un système qui **respecte** l'idée d'un système qui évolue lentement. En analysant l'argument de la controverse dans le cadre d'un système concret, nous avons pu observer ce qui se passe réellement. L'expression du critère "standard" ne discrimine pas les systèmes évoluant lentement des systèmes évoluant rapidement, mais variant peu de façon absolue. Donc, le fait que le critère "standard" soit respecté ne garantit pas qu'il soit correct d'utiliser l'approximation adiabatique. Il faut d'abord s'assurer que le système respecte notre idée intuitive d'un système qui évolue lentement.

Par la suite, nous avons étudié les conditions de validité de l'approximation adiabatique. Pour ce faire, nous avons présenté un nouveau développement qui sert à écrire l'état quantique d'un objet à un temps quelconque. L'ordre des termes de ce développement est lié au nombre de transitions que le système subit durant l'intervalle de temps considéré.

Par ailleurs, il s'est avéré que l'étude de la convergence de ce développement soit un tremplin très utile pour étudier les conditions de validité de l'approximation adiabatique. En effet, nous avons vu qu'il était possible pour un certain type de Hamiltoniens (dits *génériques*) de trouver une formule générale très simple pour l'ordre de grandeur des termes du développement ; et ce à un ordre quelconque. (L'ordre de grandeur des termes du développement nous renseigne directement sur la validité de l'approximation adiabatique.) Nous avons trouvé que la durée de

l'intervalle de temps sur lequel on considère le système influence fortement l'ordre de grandeur des termes du développement ; et donc la probabilité de transition vers d'autres états du spectre. Ceci nous indique donc que l'approximation adiabatique n'est pas valide pour tout temps. Pour un Hamiltonien défini et évoluant lentement, le système finira tout de même, (si on attend assez longtemps), par effectuer une transition. Par contre, nous avons également constaté que plus le système évolue lentement, plus le temps de dépeuplement de l'état initial sera long ; ce qui respecte l'idée de l'approximation adiabatique.

Finalement, nous avons vérifié nos conclusions en étudiant un système concret pour lequel on peut résoudre exactement l'équation de Schrödinger. Nous avons vu qu'on pouvait retrouver, à partir de l'état exact, les termes du développement présenté plus tôt ainsi que la formule générale pour estimer l'ordre de grandeur des termes de la série.

Pour terminer, il est à noter qu'un certain point de notre analyse reste quelque peu délicat. Au chapitre 3, à la section 3.3.2, lors de la dérivation de la formule générale de l'ordre de grandeur des termes, (formule de laquelle nous tirons directement nos conclusions), nous avons imposé une restriction qui, pour se répéter, sans être interdite, fait perdre un peu de généralité à notre analyse. Par contre, il s'est avéré que le système concret étudié au dernier chapitre respectait naturellement cette restriction. Il serait intéressant, pour un travail futur, d'éclaircir ce point et de voir si nos conclusions en seraient changées. Mais pour le présent mémoire, nous laisserons ce point en suspens quelque part...

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **M. Born & V. Fock**, *Beweis des adiabatenatzes*, Z. Phys., 51 :165-169 (1928).
- [2] **A. Messiah**, *Mécanique Quantique-tome II*, Dunod Paris (1964).
- [3] **R.L. Liboff**, *Introductory Quantum Mechanics, Third Edition*, Addison-Wesley (1998).
- [4] **D.J. Griffiths**, *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall (1995).
- [5] **L.I. Schiff**, *Quantum Mechanics, Third Edition*, McGraw-Hill Book Company (1968).
- [6] **J.J. Sakurai**, *Modern Quantum Mechanics, Third Edition*, Blabla (1968).
- [7] **A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koizumi, Q. Niu & J. Zwanziger** , *The Geometric Phase in Quantum Systems*, Springer (2003).
- [8] **K. Gottfried & T.-M. Yan**, *Quantum Mechanics : Fundamentals, Second Edition*, Springer (2003).
- [9] **K.-P. Marzlin & B. C. Sanders**, *Inconsistency in the application of the adiabatic theorem*, Phys. Rev. Lett. 93, 160408 (2004). [[quant-ph/0404022](#)]
- [10] **M.S. Sarandy, L.-A. Wu & D.A. Lidar**, *Consistency of the Adiabatic Theorem*, Quantum Information Processing 3, 331 (2004). [[quant-ph/0405059](#)]
- [11] **D.M. Tong, K. Singh, L.C. Kwek & C.H. Oh**, *Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation*, Phys. Rev. Lett. 95, 110407 (2005). [[quant-ph/0509073](#)]
- [12] **L.D. Landau**, Phys. Zeitschrift 2, 46 (1932) ; **C. Zener**, Proc. R. Soc. Lond. Ser. A 137 696 (1932).
- [13] **M. Gell-Mann & F. Low**, Phys. Rev. 84, 350 (1951).
- [14] **M.V, Berry**, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, Proc. R. Soc. A 392, 45-57 (1984).

- [15] **E. Farhi, J. Goldstone, S. Gutmann & M. Sipser**, *Quantum Computation by Adiabatic Evolution*, (2000). [[quant-ph/0001106](#)]
- [16] **R. MacKenzie, E. Marcotte & H. Paquette**, *A new perturbative approach to the adiabatic approximation*, *Phys. Rev. A* 73, 042104 (2006). [[quant-ph/0510024](#)]

