To be determined...

Mathis Beaudoin

To be determined

Table des matières

1 Équations maîtres

1.1 Équation de Schrödinger et opérateur d'évolution

L'évolution temporelle d'un système quantique est décrit par la célèbre équation de Schrödinger où on pose ici $\hbar = 1$:

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi(t)\right\rangle = H(t)\left|\psi(t)\right\rangle \tag{1.1}$$

En définissant un opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ qui amène un état du temps t_0 au temps t, c'est-à-dire que $\left|\psi(t)\right\rangle = U(t, t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle$, on peut l'injecter dans (1) afin d'avoir

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t, t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle = H(t)U(t, t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle \implies i\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \tag{1.2}$$

Ici, la dérivée totale devient partielle par la règle de dérivation en chaîne pour les fonctions multivariables. Par ailleurs, il va de soi que $U(t, t) = \mathbb{I}$ pour tout temps t, car il n'y a alors, selon notre définition, aucune évolution qui a lieu. Dans ce cas, comme rien ne se passe, il faut que l'opérateur d'évolution soit l'identité. Aussi, on peut décomposer une évolution $U(t, t_0)$ en plusieurs évolutions une à la suite de l'autre de manière à avoir $U(t, t_0) = U(t, t_1)U(t_1, t_0)$ par exemple (il pourrait y en avoir autant qu'on veut).

1.2 Système fermé et hamiltonien statique

Pour un système fermé et dont l'hamiltonien est statique (donc indépendant du temps), (1.2) devient

$$i\frac{\partial}{\partial t}U(t, t_0) = HU(t, t_0) \implies \int_{U(t_0,t_0)}^{U(t,t_0)} \frac{\mathrm{d}U'}{U'} = -iH\int_{t_0}^{t} dt' \implies U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)} \tag{1.3}$$

1.3 Système fermé et hamiltonien dynamique

Sachant la forme de l'opérateur d'évolution lorsque l'hamiltonien est constant, on peut approximer l'opérateur d'évolution dans le cas où l'hamiltonien est dynamique. En effet, pour une variation infinitésimale de temps δt, l'hamiltonien change à peine de sa forme de départ et on peut le considérer comme étant constant sur ce petit intervalle. Lorsqu'on dit constant, on veut plutôt dire que l'hamiltonien est évalué à un point fixe à quelque part dans le petit intervalle de temps et ce pour toute la durée de l'opérateur d'évolution. Ainsi,

$$U(t + \delta t, t) \approx e^{-iH(t)\delta t}$$

Ici, on évalue l'hamiltonien à t, car de toute manière $\delta t \to 0$ ce qui en fait un choix pratique. Cependant, on aimerait avoir une forme explicite pour l'opérateur d'évolution sur une plus grande période de temps. On sait qu'on peut découper l'évolution, par exemple, en N sous-intervalles égaux de temps $\epsilon = \frac{t-t_0}{N}$ pour que

$$U(t, t_0) = \prod_{k=1}^{N} U(t_0 + k\epsilon, t_0 + (k-1)\epsilon)$$

Dans la limite où $\epsilon \to 0$ (donc où $N \to \infty$), l'approximation plus haut est valide (les sous-intervalles deviennent infiniment petits) et dès lors on peut se dire que

$$U(t_0 + k\epsilon, t_0 + (k-1)\epsilon) \approx e^{-i\epsilon H(t_0+(k-1)\epsilon)}$$

Alors,

$$U(t,t_0) = \lim_{\epsilon\to 0} \prod_{k=1}^{N} U(t_0 + k\epsilon, t_0 + (k-1)\epsilon) = \lim_{\epsilon\to 0} \prod_{k=1}^{N} e^{-i\epsilon H(t_0+(k-1)\epsilon)} = \lim_{\epsilon\to 0} e^{-i\epsilon H(t_0)} e^{-i\epsilon H(t_0+\epsilon)} ... e^{-i\epsilon H(t-\epsilon)}$$

On serait très tenté de combiner les exponentielles en sommant leur argument, mais on travaille avec des matrices et il faut alors faire attention. Effectivement, on peut combiner deux exponentielles contenant une matrice uniquement lorsque ces matrices commutent. Autrement, il faudrait utiliser la formule de Baker-Campbell-Hausdorff qui ne semble pas nous faire progresser avec son infinité de termes. On s'attarde alors aux deux cas possibles.

1.3.1 Les hamiltoniens commutent

D'abord, en supposant que tous les $H(t_i)$ dans les exponentielles commutent entre eux, donc que $[H(t_i), H(t_j)] = 0 \;\forall i, j$, il est possible de combiner toutes les exponentielles de la manière suivante :

$$U(t,t_0) = \lim_{\epsilon\to 0} e^{-i\sum_{k=0}^{N-1} H(t_0+k\epsilon)\epsilon} = e^{-i\int_{t_0}^{t} H(t^{'})dt^{'}} \tag{1.4}$$

On voit clairement que si l'hamiltonien est constant, alors il peut être sorti de l'intégrale redonnant ainsi (1.3).

1.3.2 Les hamiltoniens ne commutent pas

Pour ce cas, on utilise une approche itérative. Depuis (1.2) et par une approche similaire à (1.3), on peut écrire

$$\int_{U(t_0,t_0)}^{U(t,t_0)} dU^{'} = -i \int_{t_0}^{t} H(t^{'})U(t^{'}, t_0)dt^{'} \implies U(t,t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t} H(t^{'})U(t^{'}, t_0)dt^{'}$$

Il ne s'agit pas d'une solution, car on trouve $U(t, t_0)$ des deux côtés de l'équation. Par contre, avec ce fait, on peut remplacer l'équation dans elle-même en prenant soin de changer la notation un peu maladroite pour ce qu'on s'apprête à faire.

$$\begin{aligned} U(t,t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t} H(t_1)U(t_1,t_0)dt_1 &= \mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t} H(t_1) \left(\mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t_1} H(t_2)U(t_2,t_0)dt_2 \right) dt_1 \\ &= \mathbb{I} - i \int_{t_0}^{t} H(t_1)dt_1 - \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2)U(t_2,t_0)dt_2 dt_1 \end{aligned}$$

On répète le processus à l'infini afin d'obtenir

$$
\begin{aligned}
U(t,t_0) &= \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty}(-i)^n \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} ... \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)...H(t_n)dt_n...dt_2dt_1 \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} ... \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)...H(t_n)dt_n...dt_2dt_1
\end{aligned} \tag{1.5}
$$

ce qu'on appelle une série de Dyson. Par construction, les variables d'intégration respectent $t_1 \geq t_2 \geq ... \geq t_n$ et il est aussi hautement non-trivial de montrer que (1.5) converge. De plus, la notation peut sembler être bizarre pour le terme $n = 0$ et $n = 1$ avec une borne d'intégration t_{-1} et une intégrale de t_0 à t_0 respectivement. En tant que tel, à cause de $\int_{t_0}^{t_1} ... \int_{t_0}^{t_{n-1}}$, on comprend implicitement que ça n'a de sens que pour $n \geq 2$. Pour le terme $n = 0$ et $n = 1$, on fait un abus de notation pour les inclure et avoir une équation plus propre. On rappelle ici le terme $n = 0$ et $n = 1$.

$$
n = 0 : \mathbb{I}, \quad n = 1 : -i\int_{t_0}^{t} H(t_1)dt_1
$$

Il peut être difficile de voir comment (1.5) se réduit à (1.4) ou à (1.3) avec un changement approprié des conditions. On introduit alors l'opérateur de produit chronologique T qui réordonne un produit matriciel de manière à ce que l'argument en temps des matrices dans le produit soit décroissant de la gauche vers la droite. Autrement dit,

$$
T[H(t_1)H(t_2)...H(t_n)] = H(t_{i_1})H(t_{i_2})...H(t_{i_n}) \text{ où } t_{i_1} \geq t_{i_2} \geq ... \geq t_{i_n} \tag{1.6}
$$

Évidemment, si tous les hamiltoniens commutent entre eux, alors T ne sert à rien. Pour clarifier l'utilisation de l'opérateur de produit chronologique, on revient à (1.5) en s'attardant à J_2 l'intégrale du terme $n = 2$ de la somme.

$$
J_2 = \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2)dt_2dt_1
$$

Il est important de conserver le même ordre pour la multiplication matricielle, car par hypothèse les hamiltoniens ne commutent pas. Dans cette dernière équation, l'ordre d'intégration fait en sorte que $t_1 \geq t_2$, ce qu'on peut voir en représentant la région d'intégration (qui est la moitié de l'aire d'un carré de côté t *mettre un dessin). Ainsi, on peut directement incorporer l'opérateur de produit chronologique dans J_2.

$$
J_2 = \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2)dt_2dt_1 = \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} T\left[H(t_1)H(t_2)\right]dt_2dt_1
$$

Sans changer la valeur de J_2, on peut changer l'ordre d'intégration de la manière suivante :

$$
J_2 = \int_{t_0}^{t}\int_{t_2}^{t} H(t_1)H(t_2)dt_1dt_2
$$

En représentant cette nouvelle région d'intégration, on voit qu'elle reste la même sauf que maintenant l'intégration se fait "horizontalement" au lieu de "verticalement". On peut ensuite procéder à un changement de variables (qui ne change toujours pas la valeur de J_2) où $t_1 \Leftrightarrow t_2$.

$$
J_2 = \int_{t_0}^{t}\int_{t_1}^{t} H(t_2)H(t_1)dt_2dt_1
$$

La région d'intégration fait alors une réflexion par rapport à l'axe de la droite $t_1 = t_2$ et correspond alors à la moitié restante de l'aire du carré de côté t. Dans ce cas, $t_2 \geq t_1$ et on écrit

$$J_2 = \int_{t_0}^{t} \int_{t_1}^{t} H(t_2)H(t_1)dt_2dt_1 = \int_{t_0}^{t} \int_{t_1}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1$$

Au final, on vient de trouver 2 formes différentes pour J_2.

$$J_2 = \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t_1} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1 = \int_{t_0}^{t} \int_{t_1}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1 \tag{1.7}$$

On remarque qu'en sommant ensemble chacune des formes, on peut avoir une formule pour J_2 où les bornes d'intégration ne dépendent plus des t_i. On peut ensuite l'incorporer dans (1.5).

$$2J_2 = \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t_1} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1 + \int_{t_0}^{t} \int_{t_1}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1 = \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1$$

$$\implies J_2 = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)\right] dt_2dt_1 \tag{1.8}$$

En général, pour J_n, il existera $n!$ façons différentes de l'écrire (pour les $n!$ façons d'organiser les n hamiltoniens qui seront présents $\rightarrow$ les $n!$ changements de variables possibles). Par la suite, en sommant ces $n!$ équations, toutes les dépendances sur les t_i partiront et la somme correspondra à $n!J_n$. Finalement, on isole J_n pour obtenir

$$J_n = \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} ... \int_{t_0}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)...H(t_n)\right] dt_n...dt_2dt_1 \tag{1.9}$$

qu'on remplace dans (1.5) donnant ainsi

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} ... \int_{t_0}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)...H(t_n)\right] dt_n...dt_2dt_1$$

De là, si les hamiltoniens commutent (donc que T ne fait rien), on voit qu'on peut retomber sur (1.4).

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} ... \int_{t_0}^{t} H(t_1)H(t_2)...H(t_n)dt_n...dt_2dt_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \left(\int_{t_0}^{t} H(t^{'})dt^{'} \right)^n$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-i \int_{t_0}^{t} H(t^{'})dt^{'} \right)^n = e^{-i \int_{t_0}^{t} H(t^{'})dt^{'}}$$

Dans les ouvrages, on utilise plutôt l'écriture

$$U(t, t_0) = Te^{-i \int_{t_0}^{t} H(t^{'})dt^{'}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t_0}^{t} \int_{t_0}^{t} ... \int_{t_0}^{t} T\left[H(t_1)H(t_2)...H(t_n)\right] dt_n...dt_2dt_1 \tag{1.10}$$

1.3.3 Écriture alternative

Il peut être parfois plus logique d'écrire (1.5) selon l'ordre d'application des hamiltoniens sur un état (ce que certains auteurs préfèrent). On veut dire par là qu'on aimerait avoir l'indice t_1 pour l'hamiltonien le plus à droite, t_2 pour celui à sa gauche et t_n pour l'hamiltonien le plus à gauche. Autrement dit, on veut inverser l'écriture de (1.5). On part depuis

$$U(t,t_0) = \mathbb{I} - i\int_{t_0}^{t} H(t_1)U(t_1,t_0)dt_1$$

Auparavant, en remplaçant l'équation dans elle-même, on a

$$U(t,t_0) = \mathbb{I} - i\int_{t_0}^{t} H(t_1)dt_1 - \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2)U(t_2,t_0)dt_2dt_1$$

Pour respecter la nouvelle notation, on a ici seulement besoin de renommer les variables du terme tout à droite.

$$U(t,t_0) = \mathbb{I} - i\int_{t_0}^{t} H(t_1)dt_1 - \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_2} H(t_2)H(t_1)U(t_1,t_0)dt_1dt_2$$

En continuant le processus et en renommant les variables comme il faut, on obtient une forme générale pour cette notation alternative.

$$U(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t_n}...\int_{t_0}^{t_2} H(t_n)...H(t_1)dt_1...dt_{n-1}dt_n \tag{1.11}$$

2 Oscillatory drive problem

2.1 Préliminaires

On considère un hamiltonien dépendant du temps de la forme

$$H(t) = H_0 + V(t) \tag{2.1}$$

où $H_0 = \sum_k \lambda_k |k\rangle\langle k|$ dans sa base d'états propres et $V(t) = X\cos(\omega t)$ pour un certain opérateur X. En décomposant le cosinus en exponentielles complexes,

$$H(t) = H_0 + X\left(\frac{e^{i\omega t}+e^{-i\omega t}}{2}\right)$$

Pour une variation infime de temps et en utilisant la définition de (2.1), on trouve (et ce n'est pas très beau)

$$U(t+\delta t,t) = \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n\int_{t}^{t+\delta t}\int_{t}^{t_n}...\int_{t}^{t_2} H(t_n)...H(t_1)dt_1...dt_n$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n \int_t^{t+\delta t}\int_t^{t_n}...\int_t^{t_2} (H_0+V(t_n))\,...\,(H_0+V(t_1))\,dt_1...dt_n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-i)^n \int_t^{t+\delta t}\int_t^{t_n}...\int_t^{t_2} (H_0...H_0+H_0...H_0V(t_1)+...+V(t_n)H_0...H_0+...+V(t_n)...V(t_1))\,dt_1...dt_n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\int_t^{t+\delta t}\int_t^{t_n}...\int_t^{t_2}(-i)^n H_0...H_0 dt_1...dt_n+...+\sum_{n=0}^{\infty}\int_t^{t+\delta t}\int_t^{t_n}...\int_t^{t_2}(-i)^n V(t_n)...V(t_1)dt_1...dt_n
\end{aligned} \tag{2.2}
$$

On peut voir que la distribution des termes correspond à l'ensemble des combinaisons de n opérateurs où on choisit soit H_0 ou $V(t)$ pour chacun d'eux. Il y a donc au total 2^n termes chacun n opérateurs pouvant alterner entre des suites de H_0 ou de $V(t)$ de différentes longueurs.

2.2 Dérivation (partie 1)

On considère maintenant pour la suite n comme étant le nombre de $V(t)$ présents dans chaque terme de (2.2) et on omet temporairement les indices $V(t_j)$ pour éviter de se mélanger avec l'ancienne écriture. Il faut alors un nouveau moyen d'écrire (2.2) avec ce changement de variables. Pour se faire, on introduit les m_i qui indiqueront combien d'applications de H_0 il y a avant une application de $V(t)$. Par exemple,

$$
\begin{aligned}
H_0V(t)H_0H_0 = (H_0)^1V(t)(H_0)^2 = (H_0)^{m_1}V(t)(H_0)^{m_0} &\implies m_0=2, m_1=1 \\
V(t)V(t) = (H_0)^0V(t)(H_0)^0V(t)(H_0)^0 &\implies m_0=m_1=m_2=0
\end{aligned}
$$

En général, ils sont indexés de m_0 à m_n, car pour un nombre n de $V(t)$, on peut avoir jusqu'à $n+1$ blocs $H_0...H_0$ ayant des longueurs différentes.

$$
\underline{H_0H_0}V(t):\ \text{1 bloc},\ \underline{H_0}V(t)\underline{H_0}:\ \text{2 blocs},\ V(t)\underline{H_0H_0}:\ \text{1 bloc}
$$

Cependant, par la somme infinie de (2.2), ces blocs peuvent être arbitrairement longs, faisant en sorte que les m_i peuvent prendre des valeurs entre 0 et l'infini. Il est plus concis de les mettre dans un vecteur $\boldsymbol{m}=[m_n,...,m_0]\in\mathbb{Z}_+^{n+1}$. Ainsi, de manière générale, on peut écrire toute chaîne d'opérateurs comme

$$
(H_0)^{m_n}V(t)(H_0)^{m_{n-1}}V(t)...(H_0)^{m_1}V(t)(H_0)^{m_0} \tag{2.3}
$$

dont on obtient sa longueur M (le nombre total d'opérateurs) grâce à

$$
M = \left(\sum_{i=0}^{n} m_i\right) + n \tag{2.4}
$$

2.3 Dérivation (partie 2)

La prochaine étape est maintenant de retrouver les indices dans les $V(t)$ avec notre nouvelle notation. On sait déjà qu'il y aura n opérateurs $V(t)$, mais on doit pouvoir retrouver leur positionnement dans la chaîne d'opérateurs. On peut simplement compter combien il y a de H_0 et d'autres $V(t)$ avant celui qui nous intéresse. Par exemple, pour $n=2$, on pourrait avoir la chaîne

$$H_0V(t)H_0V(t)H_0 \implies \boldsymbol{m} = [1,1,1]$$

Le premier $V(t)$ s'applique nécessairement après $m_0 = 1$ opérateur H_0. Le deuxième s'applique nécessairement après $m_0 = 1$ opérateur H_0, un $V(t)$ puis $m_1 = 1$ opérateur H_0. Si $p \in [1..n]$ est une variable qui passe en travers des n opérateurs $V(t)$, alors il est facile de voir qu'on indexe $V(t)$ par la fonction

$$l(p) = \left(\sum_{j=0}^{p-1} m_j\right) + p \tag{2.5}$$

Pour reprendre l'exemple, on aurait

$$H_0V(t_{l(2)})H_0V(t_{l(1)})H_0 = H_0V(t_{m_1+m_0+2})H_0V(t_{m_0+1})H_0 = H_0V(t_4)H_0V(t_2)H_0$$

ce qui exactement ce qu'on aurait dans (2.2).

2.4 Dérivation (partie 3)

Ensuite, on étend les $V(t_{l(p)})$ selon leur définition :

$$V(t_{l(p)}) = X\left(\frac{e^{i\omega t_{l(p)}} + e^{-i\omega t_{l(p)}}}{2}\right)$$

Dans le contexte général de la partie avec les intégrales de (2.2), les équations (2.3) et (2.4) donnent

$$\begin{aligned}
&\int_t^{t+\delta t}\int_t^{t_M}...\int_t^{t_2}(-i)^M(H_0)^{m_n}V(t)...V(t)(H_0)^{m_0}dt_1...dt_M \\
&=\int_t^{t+\delta t}\int_t^{t_M}...\int_t^{t_2}(-i)^n(-iH_0)^{m_n}V(t)...V(t)(-iH_0)^{m_0}dt_1...dt_M
\end{aligned} \tag{2.6}$$