

**To be determined...**

Mathis Beaudoin

To be determined

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Équations maîtres</b>	<b>1</b>
1.1	Équation de Schrödinger et opérateur d'évolution . . . . .	1
1.2	Système fermé et hamiltonien statique . . . . .	1
1.3	Système fermé et hamiltonien dynamique . . . . .	1
1.3.1	Les hamiltoniens commutent . . . . .	2
1.3.2	Les hamiltoniens ne commutent pas . . . . .	2
1.3.3	Écriture alternative . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Oscillatory drive problem</b>	<b>5</b>
2.1	Cas simple . . . . .	5

# 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  $\hbar = 1$  :

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (1.1)$$

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  $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ , on peut l'injecter dans (1) afin d'avoir

$$i \frac{d}{dt} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = H(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \implies i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (1.2)$$

Ici, la dérivée totale devient partielle par la règle de dérivation en chaîne pour les fonctions multivariées. 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

$$i \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \implies \int_{U(t_0, t_0)}^{U(t, t_0)} \frac{dU'}{U'} = -iH \int_{t_0}^t dt' \implies U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)} \quad (1.3)$$

## 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  $\delta t$ , 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  $\delta t \rightarrow 0$  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  $\epsilon \rightarrow 0$  (donc où  $N \rightarrow \infty$ ), 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,

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

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 :

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

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

$$\begin{aligned}
U(t, t_0) &= \mathbb{I} + \sum_{n=1}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n) dt_n \dots dt_2 dt_1 \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} H(t_1)H(t_2)\dots H(t_n) dt_n \dots dt_2 dt_1
\end{aligned} \tag{1.5}$$

ce qu'on appelle une série de Dyson. Par construction, les variables d'intégration respectent  $t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n$  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  $\int_{t_0}^{t_1} \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}}$ , 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,

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

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.

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2) dt_2 dt_1$$

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  $J_2$ .

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1)H(t_2) dt_2 dt_1 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} T[H(t_1)H(t_2)] dt_2 dt_1$$

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

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_2}^t H(t_1)H(t_2) dt_1 dt_2$$

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  $t_1 \Leftrightarrow t_2$ .

$$J_2 = \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t H(t_2)H(t_1) dt_2 dt_1$$

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

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

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

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

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).

$$\begin{aligned} 2J_2 &= \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} T[H(t_1)H(t_2)]dt_2dt_1 + \int_{t_0}^t \int_{t_1}^t T[H(t_1)H(t_2)]dt_2dt_1 = \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t T[H(t_1)H(t_2)]dt_2dt_1 \\ \Rightarrow J_2 &= \frac{1}{2} \int_{t_0}^t \int_{t_0}^t T[H(t_1)H(t_2)]dt_2dt_1 \end{aligned} \quad (1.8)$$

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

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

qu'on remplace dans (1.5) donnant ainsi

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

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

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

Dans les ouvrages, on utilise plutôt l'écriture

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

### 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

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} H(t_1) H(t_2) U(t_2, t_0) dt_2 dt_1$$

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

$$U(t, t_0) = \mathbb{I} - i \int_{t_0}^t H(t_1) dt_1 - \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_2} H(t_2) H(t_1) U(t_1, t_0) dt_1 dt_2$$

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

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

## 2 Oscillatory drive problem

### 2.1 Cas simple

On considère un hamiltonien dépendant du temps de la forme

$$H(t) = H_0 + V(t) \quad (2.1)$$

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)

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

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} (H_0 + V(t_n)) \dots (H_0 + V(t_1)) dt_1 \dots dt_n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} (H_0 \dots H_0 + H_0 \dots H_0 V(t_1) + V(t_n) H_0 \dots H_0 + V(t_n) \dots V(t_1)) dt_1 \dots dt_n \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} (-i)^n \left( \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} H_0 \dots H_0 dt_1 \dots dt_n + \dots + \int_t^{t+\delta t} \int_t^{t_n} \dots \int_t^{t_2} V(t_n) \dots V(t_1) dt_1 \dots dt_n \right) \quad (2.2)
\end{aligned}$$

Comme on peut le voir, cela devient une horreur très rapidement. Tout de même, dans (2.2), on peut voir la distribution des termes comme si on assignait à chaque case d'une liste de  $n$  opérateurs soit  $H_0$  ou  $V(t)$ . Il y a donc au total  $2^n$  combinaisons, c'est-à-dire  $2^n$  termes chacun de  $n$  opérateurs dans la grosse parenthèse de (2.2).

De manière générale, on les peut écrire

$$d$$

Pour chaque terme contenant un  $V(t_j)$ , par sa définition on peut sortir un facteur  $\frac{1}{2}$  en dehors de l'intégrale.