

Soutenance de Projet 3A

Théo Duez

Encadré par Antoine Levitt

Présentation du projet :

Titre : La règle d'or de Fermi

Thématiques : Mécanique quantique, Théorie Spectrale,
Problème d'évolution, Simulation Numérique

Encadré par Antoine Levitt, professeur à l'institut mathématiques d'Orsay

I. Introduction

Brefs rappels de théorie spectrale

	Matrice	Opérateur (non borné)
Définition	M $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$	A $D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$
Spectre	valeurs propres (au total n avec multiplicité)	valeurs propres + spectre continue + spectre résiduel
Projecteur	Si (ψ_k) base d'un sous espace- propre alors $P = \sum_{k=1}^m \psi_k\rangle\langle\psi_k $	Projecteur sur l'ensemble du spectre inclus du boriélien Ω $E_A(\Omega) = \mathbf{1}_\Omega(A)$

Brefs rappels de mécanique quantique

Equation de Schrödinger (normalisée):

Solution de l'équation d'évolution :

$$\varphi(t) = e^{-iHt} \varphi(0)$$

La mesure d'une observable ne peut être qu'un élément du spectre de l'opérateur associé.

Probabilité de trouver le système à l'instant t dans l'état ψ : $|\langle \psi | \varphi(t) \rangle|^2$

$$i\partial_t \varphi(t) = H \varphi(t)$$

Etat d'un système quantique $\in \mathcal{H}$
espace de Hilbert
+ unitaire

Exemple :
 $L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C})$: mouvement d'un électron

Opérateur autoadjoint de \mathcal{H} représentant l'observable énergie :
l'**Hamiltonien**

Notations

- On se place sur un espace de Hilbert \mathcal{H}
- On suppose que l'on peut décomposer : $\mathcal{H} = \mathcal{K}_0 \oplus \mathcal{K}_0^\perp$ $\dim \mathcal{K}_0 = m \in \mathbb{N}^*$
- On considère le système quantique décrit par l'hamiltonien :

$$H(\epsilon) := \underbrace{\begin{pmatrix} \lambda_0 I_m & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}}_{H_0} + \epsilon \underbrace{\begin{pmatrix} B & \Gamma \\ \Gamma^* & C \end{pmatrix}}_{H_1} \left. \vphantom{\begin{pmatrix} B & \Gamma \\ \Gamma^* & C \end{pmatrix}} \right\} \begin{array}{l} \text{Perturbation d'amplitude} \\ \epsilon \end{array}$$

- Etat initial vecteur unitaire φ_0 de \mathcal{K}_0 i.e vecteur propre de H_0 de valeur propre λ_0

Règle d'or de Fermi

Objectif : Etudier $\left| \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \right|^2$

Règle d'or de Fermi : Sous certaines hypothèses :

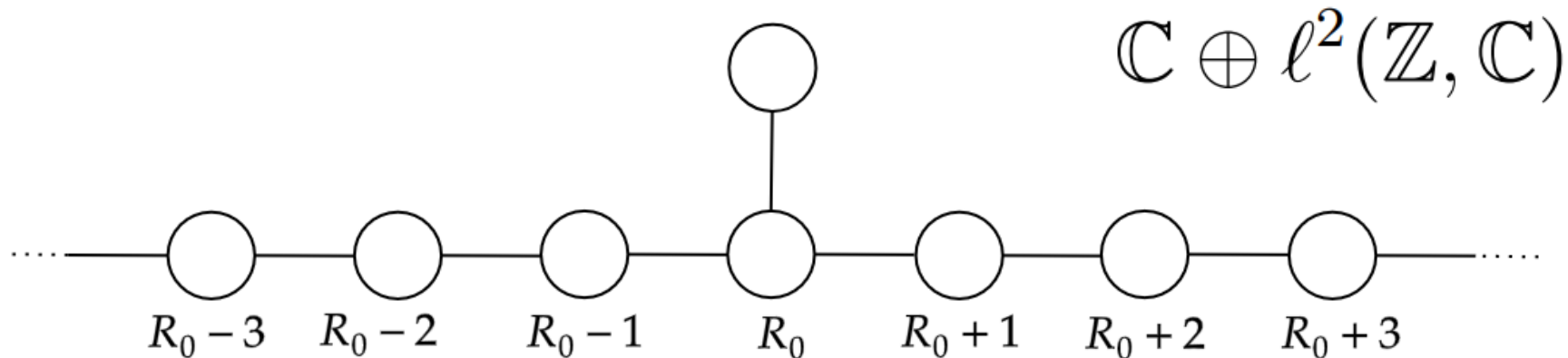
$$\left| \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \right|^2 = e^{2\Gamma(\epsilon)t} + o_\epsilon(1)$$

uniformément en temps t , où $\Gamma(\epsilon)$ est un réel négatif ou nul.

Si $\Gamma(\epsilon) = 0$ alors on reste dans l'état initial avec probabilité 1.

Sinon, on le quitte de **façon irréversible**, exponentiellement rapide en temps !

Exemple d'une chaîne 1D faiblement connectée à un site



$$H_{\text{chaîne}} = \underbrace{\begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & A \end{pmatrix}}_{H_0} + \epsilon \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & e_{R_0} \\ e_{R_0}^* & 0 \end{pmatrix}}_{H_1}$$

$$E \in \mathbb{R}, R_0 \in \mathbb{Z}$$

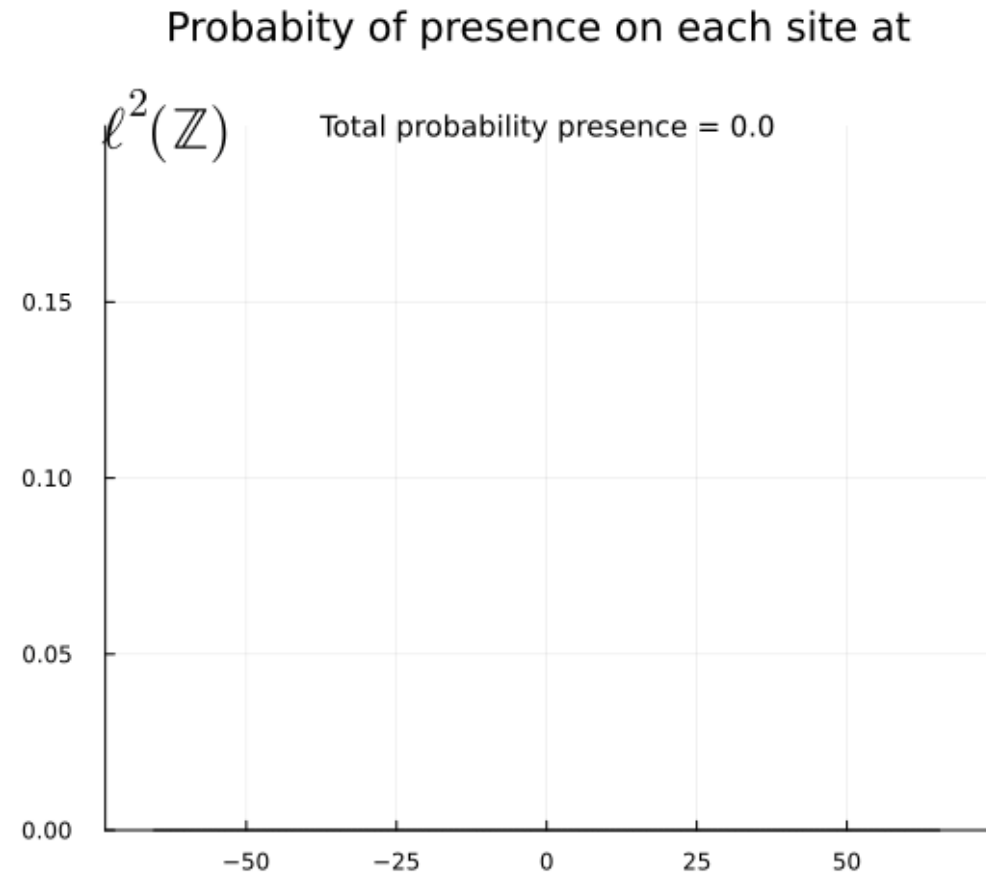
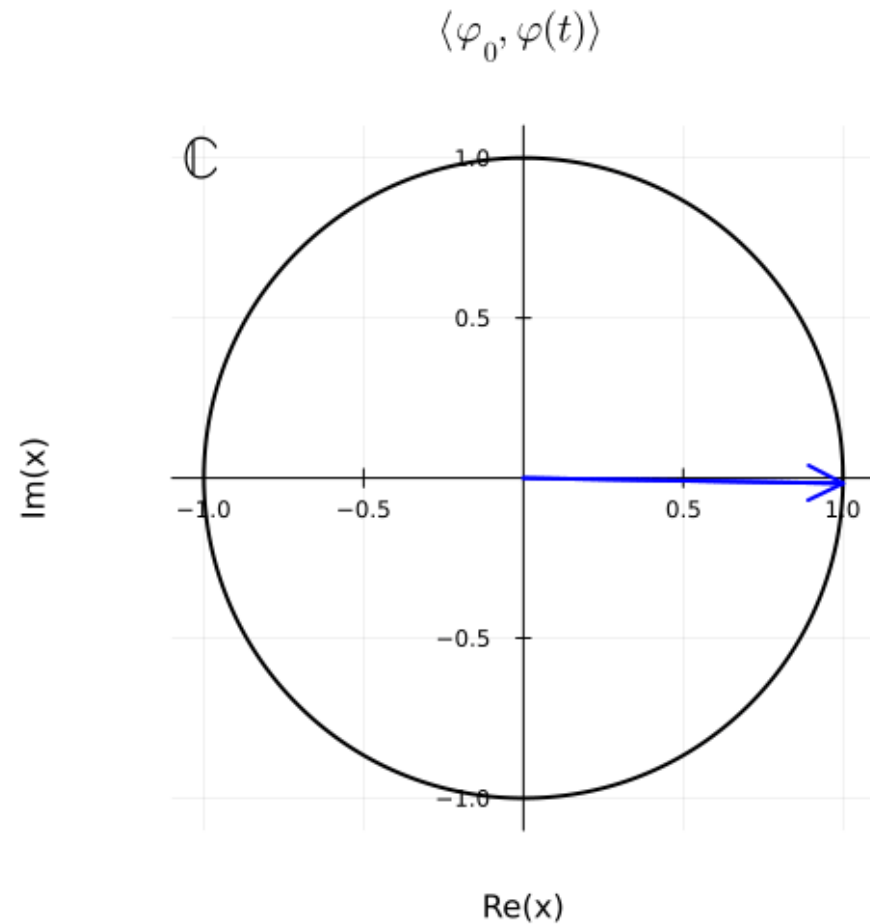
$$(e_i)_{i \in \mathbb{Z}} \text{ Base duale canonique}$$

$$A = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & \\ & \ddots & 0 & 1 & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 & 1 \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

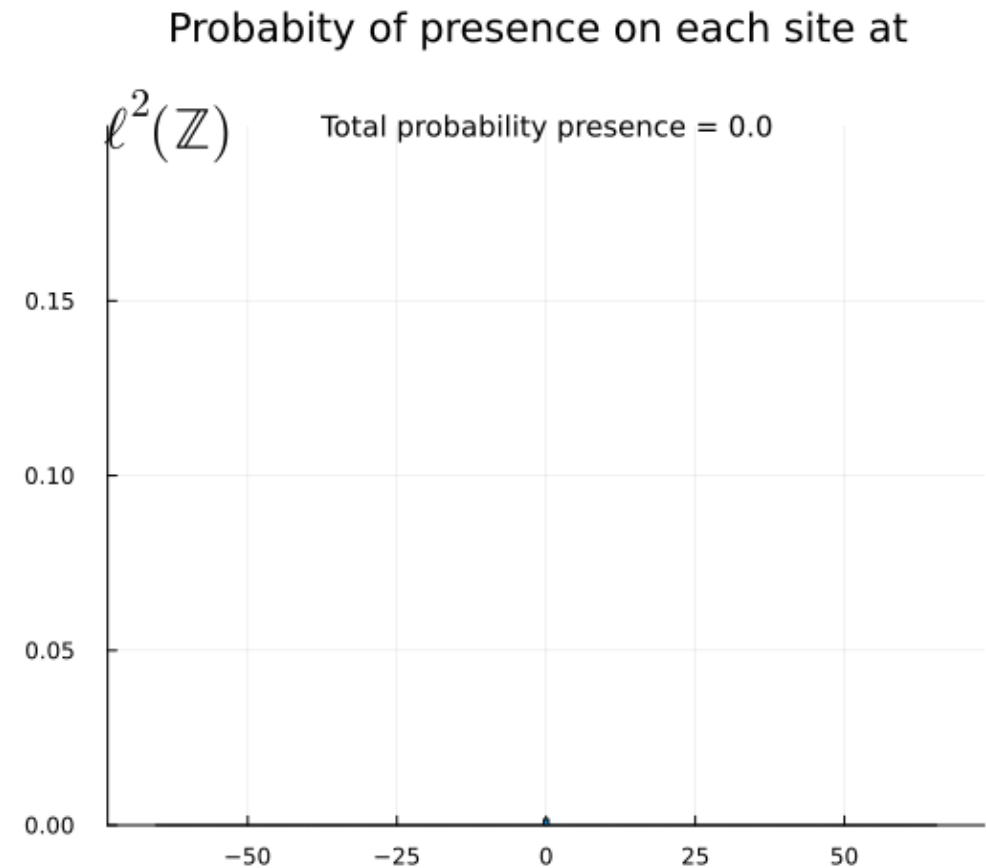
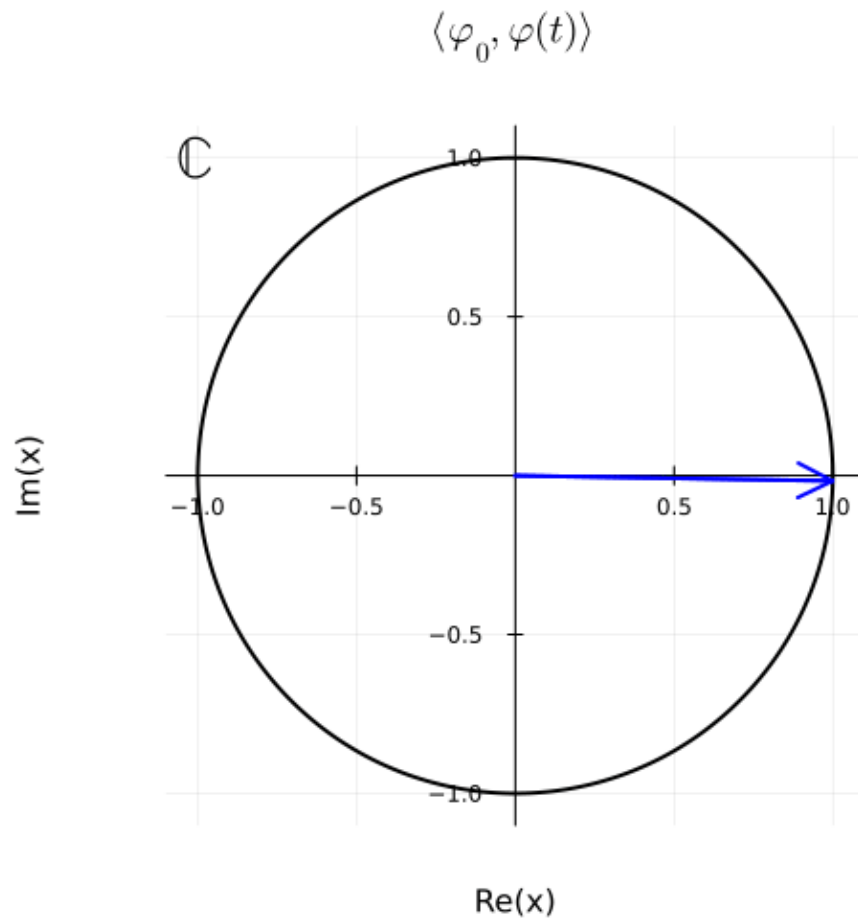
$$\ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C}) \longrightarrow \ell^2(\mathbb{Z}, \mathbb{C})$$

$$\sigma(A) = [-2, 2]$$

Exemple d'une chaîne 1D faiblement connectée à un site

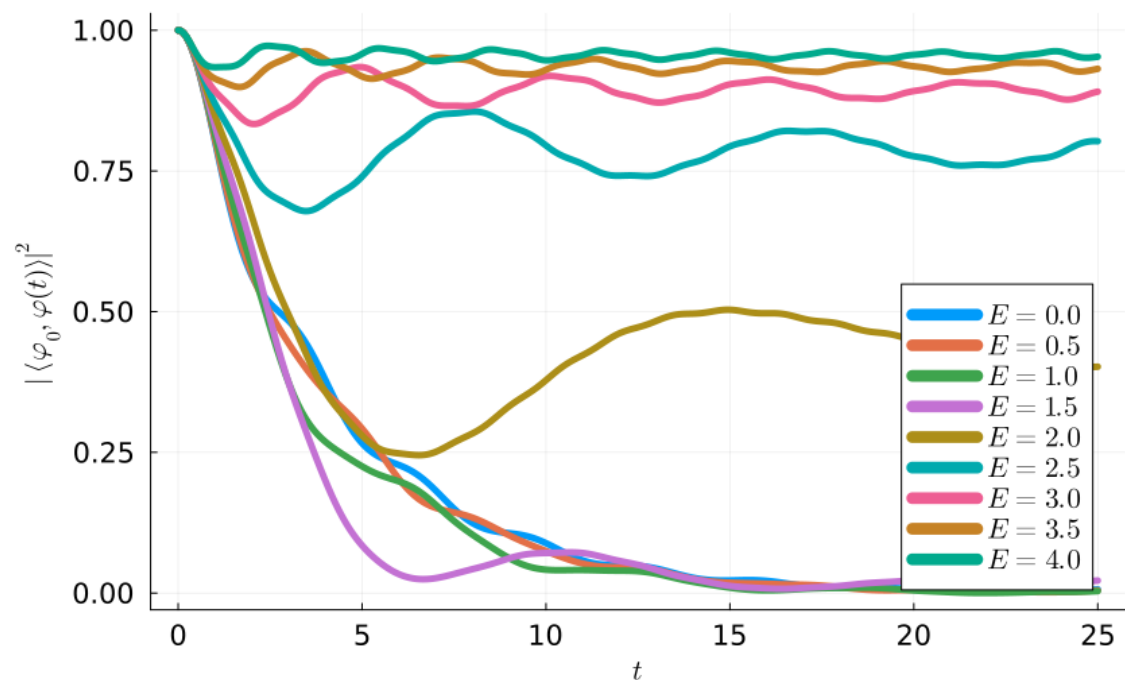


Exemple d'une chaîne 1D faiblement connectée à un site

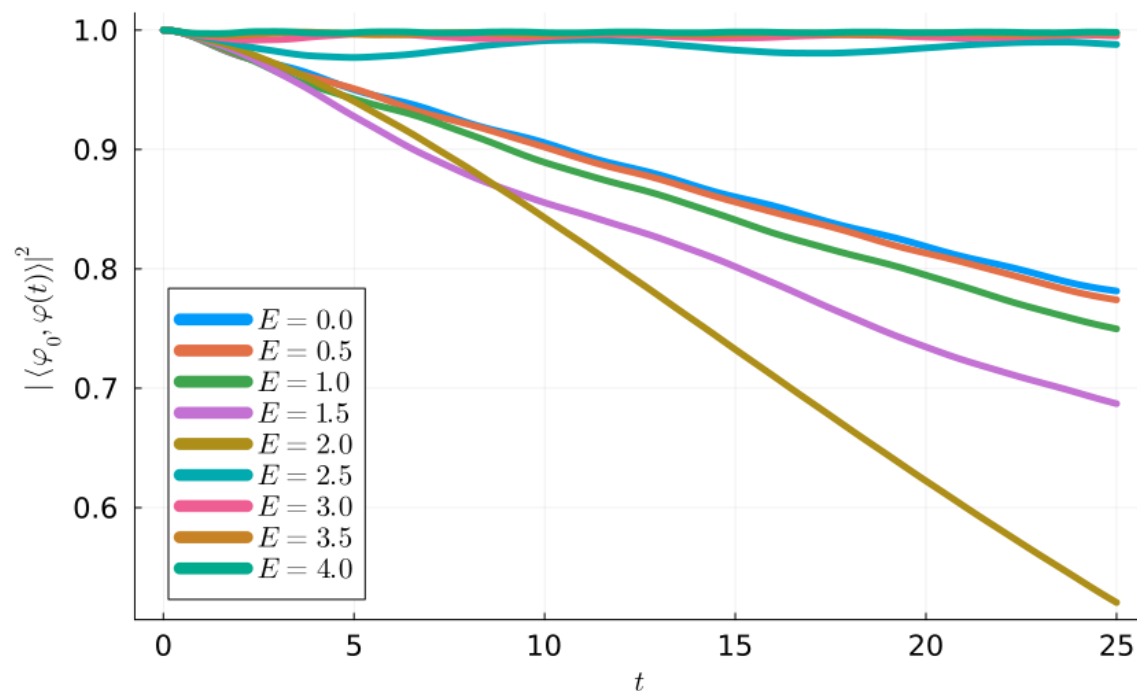


Exemple d'une chaîne 1D faiblement connectée à un site

Règle d'or de Fermi selon la valeur de E pour la chaîne 1D pour $\epsilon = 0.5$



Règle d'or de Fermi selon la valeur de E pour la chaîne 1D pour $\epsilon = 0.1$



Objectifs du projet

- I. Etudier deux types d'approches pour démontrer rigoureusement la règle d'or de Fermi :
 - Par les résonnances (théorie spectrale)
 - l'approche de Davies (problème d'évolution)
- II. En particulier, pour chacune des approches :
 - a. Lire un ou plusieurs articles,
 - b. Comprendre les hypothèses utilisées,
 - c. Etudier et clarifier les preuves.
- III. Faire quelques simulations illustratives de la règle d'or de Fermi sur un système quantique en particulier.

Sommaire

I. Introduction

II. Approche par les résonances

- a) Idées et intuitions
- b) Matrice de Livsic
- c) Théorème de Concentration Spectrale
- d) Preuve de la règle d'or de Fermi
- e) Etude de la chaîne 1D

III. Conclusion

IV. Bibliographie

II. Approche par les résonances

Idées de l'approche par les résonnances

Cas particulier $\varepsilon = 0$: le calcul est immédiat

$$| \langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} \varphi_0 \rangle |^2 = |e^{-i\lambda_0 t}|^2 = 1$$

Idées de l'approche par les résonnances


Cas particulier $\varepsilon = 0$: complexifications artificiellement l'approche

$$| \langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} \varphi_0 \rangle |^2 =$$

Idées de l'approche par les résonnances

Cas particulier $\varepsilon = 0$: complexifications artificiellement l'approche

$$| \langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} \varphi_0 \rangle |^2 = | \langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle |^2$$


$$P = E_0(\{\lambda_0\})$$

Idées de l'approche par les résonnances

Cas particulier $\varepsilon = 0$: complexifications artificiellement l'approche

$$\begin{aligned} |\langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} \varphi_0 \rangle|^2 &= |\langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle|^2 \\ &\stackrel{\text{Formule de Stone}}{=} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} |\langle \varphi_0 | \epsilon \operatorname{Im} (H_0 - \lambda_0 - i\epsilon)^{-1} \varphi_0 \rangle|^2 \end{aligned}$$

Idées de l'approche par les résonnances

Cas particulier $\varepsilon = 0$: complexifications artificiellement l'approche

$$| \langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} \varphi_0 \rangle |^2 = | \langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle |^2$$

Inverse d'un opérateur
diagonal est l'opérateur
diagonal des inverses

$$\begin{aligned} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} | \langle \varphi_0 | \epsilon \operatorname{Im} (H_0 - \lambda_0 - i\epsilon)^{-1} \varphi_0 \rangle |^2 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} | \langle \varphi_0 | \epsilon \operatorname{Im} (\lambda_0 I_m - \lambda_0 - i\epsilon)^{-1} \varphi_0 \rangle |^2 \end{aligned}$$

Idées de l'approche par les résonnances

Cas particulier $\varepsilon = 0$: complexifications artificiellement l'approche

$$\begin{aligned} |\langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} \varphi_0 \rangle|^2 &= |\langle \varphi_0 | e^{-iH_0 t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle|^2 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} |\langle \varphi_0 | \epsilon \operatorname{Im} (H_0 - \lambda_0 - i\epsilon)^{-1} \varphi_0 \rangle|^2 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} |\langle \varphi_0 | \epsilon \operatorname{Im} (\lambda_0 I_m - \lambda_0 - i\epsilon)^{-1} \varphi_0 \rangle|^2 \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} |\langle \varphi_0 | \epsilon \operatorname{Im} (-i\epsilon)^{-1} \varphi_0 \rangle|^2 \\ &= |\langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle|^2 = 1. \end{aligned}$$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\varepsilon \neq 0$?

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Problème 1 : Il faut faire apparaître la résolution spectrale perturbée pour appliquer la formule de Stone.

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Problème 1 : Il faut faire apparaître la résolution spectrale perturbée pour appliquer la formule de Stone.

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Problème 1 : Il faut faire apparaître la résolution spectrale perturbée pour appliquer la formule de Stone.

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Problème 2 : λ_0 n'est plus forcément une valeur propre de $H(\epsilon)$: possiblement on a $E_\epsilon(\{\lambda_0\}) = 0$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle = \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_0(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Problème 1 : Il faut faire apparaître la résolution spectrale perturbée pour appliquer la formule de Stone.

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda_0\}) \varphi_0 \rangle$$

Problème 2 : λ_0 n'est plus forcément une valeur propre de $H(\epsilon)$: possiblement on a $E_\epsilon(\{\lambda_0\}) = 0$

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{J(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle$$

Avec $J(\epsilon)$ ou bien un intervalle ou bien un singleton $\{\lambda(\epsilon)\}$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \langle \varphi_0 | (H(\epsilon) - \lambda)^{-1} \varphi_0 \rangle d\lambda$$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \langle \varphi_0 | (H(\epsilon) - \lambda)^{-1} \varphi_0 \rangle d\lambda$$

Problème 3 : Pour appliquer la formule de Stone, il ne faut pas que $J(\epsilon)$ intersecte le spectre de $H(\epsilon)$.

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \langle \varphi_0 | (H(\epsilon) - \lambda)^{-1} \varphi_0 \rangle d\lambda$$

Problème 3 : Pour appliquer la formule de Stone, il ne faut pas que $J(\epsilon)$ intersecte le spectre de $H(\epsilon)$.

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \langle \varphi_0 | P (H(\epsilon) - \lambda)^{-1} P \varphi_0 \rangle d\lambda$$

Idées de l'approche par les résonnances

Généralisation pour $\epsilon \neq 0$?

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \langle \varphi_0 | (H(\epsilon) - \lambda)^{-1} \varphi_0 \rangle d\lambda$$

Problème 3 : Pour appliquer la formule de Stone, il ne faut pas que $J(\epsilon)$ intersecte le spectre de $H(\epsilon)$.

$$\langle \varphi_0 | e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle \approx \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \langle \varphi_0 | P (H(\epsilon) - \lambda)^{-1} P \varphi_0 \rangle d\lambda$$

Problème 4 : Comment réécrire cette contraction en fonction des blocs de $H(\epsilon)$?

Matrice de Livsic

Rappel Résolvante d'un opérateur H :

$$R(z) := (H - z)^{-1}$$

Bien définie en tant qu'opérateur borné de \mathcal{H} dans \mathcal{H} pour z dans le complémentaire du spectre de H .

Cette famille d'opérateur est holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et méromorphe sur le complémentaire du spectre essentiel.

Matrice de Livsic

Rappel Résolvante d'un opérateur H :

$$R(z) := (H - z)^{-1}$$

Bien définie en tant qu'opérateur borné de \mathcal{H} dans \mathcal{H} pour z dans le complémentaire du spectre de H .

Cette famille d'opérateur est holomorphe sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ et méromorphe sur le complémentaire du spectre essentiel.

Matrice de Livsic sur \mathcal{K}_0 : Il s'agit de la **matrice** définie pour z sur $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ $B(z)$ tel que

$$(B(z) - z)^{-1} = P(H - z)^{-1}P.$$

en posant $B(z) := (PR(z)P)^{-1} + z$ pour z dans $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$.

Définition qui peut s'étendre sur le complémentaire du spectre essentiel.

Propriétés de la matrice de Livsic

Formule pour la matrice de Livsic : si on peut écrire dans la décomposition $\mathcal{H} = \mathcal{K}_0 \oplus \mathcal{K}_0^\perp$

$$H = \begin{pmatrix} T & \Gamma \\ \Gamma^* & A \end{pmatrix} \quad \text{alors on a} \quad B(z) = T - \Gamma(A - z)^{-1}\Gamma^* .$$

Dans le cas de la chaîne 1D : $B(\epsilon, z) = E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - z)^{-1} e_{R_0}$

« Valeurs propres » de la matrice de Livsic

Proposition 3 (Lien entre valeur propre de H et de $B(z)$). *Si \mathcal{K}_0 est cyclique alors tous zéros de $z \in \mathbb{C} \setminus \sigma_{ess}(H) \mapsto \det(B(z) - z)$ de multiplicité m est une valeur propre de H de même multiplicité.*

Propriétés de la matrice de Livsic

Formules de Stone (version Matrice de Livsic)

Proposition 4 (Formule de Stone). *Supposons que $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \mapsto B(z)$ possède une extension sur un intervalle réel I que l'on note $B(\lambda)$ pour $\lambda \in I$. Comme pour la formule de Stones classique, il y a en fait deux formules selon le cas :*

1. *Soit $J \subseteq I$ et supposons qu'aucun élément λ de J ne soit valeur propre de $B(\lambda)$.
On a alors*

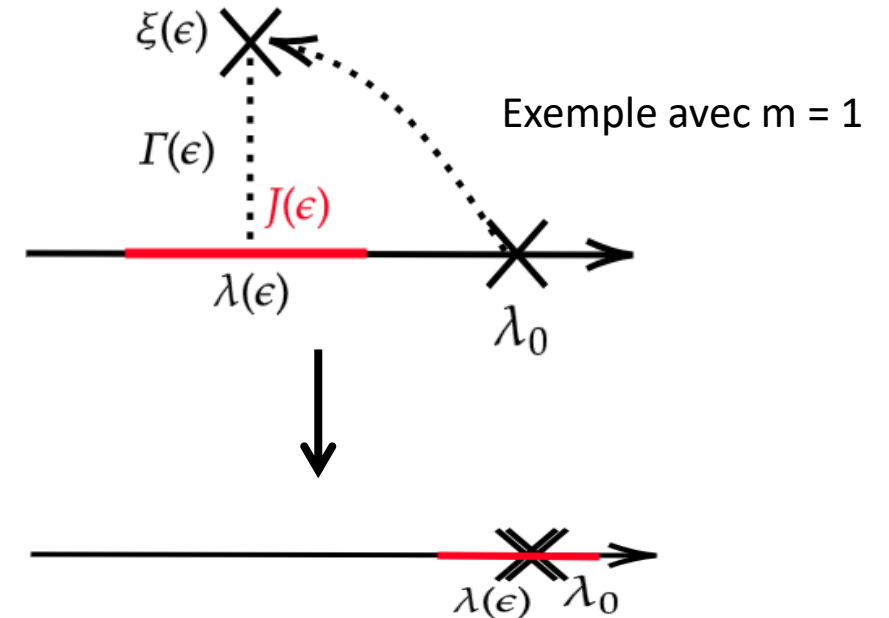
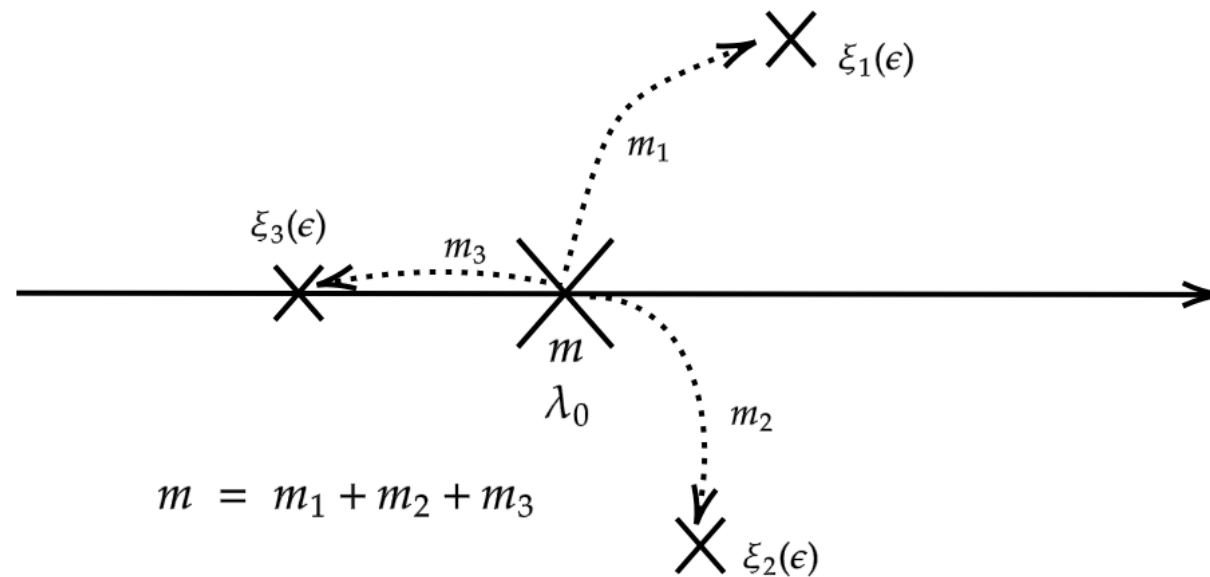
$$PE(J)P = \frac{1}{\pi} \int_J (B(\lambda) - \lambda)^{-1} d\lambda. \quad (13)$$

2. *Si $\lambda \in I$ est une valeur propre de $B(\lambda)$ alors*

$$PE(\{\lambda\})P = st - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \epsilon \operatorname{Im} (B(\lambda + i\epsilon) - \lambda - i\epsilon)^{-1}. \quad (14)$$

Théorème de concentration spectrale

On s'intéresse aux zéros de $\det(B(z, \epsilon) - z) = 0$ sachant que $B(z, 0) = \lambda_0 I_m$



$$st - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} E_\epsilon(J(\epsilon)) = E_0(\{\lambda_0\}) = P$$

TCSpec : Résonance pour Orth (1990)

Définition 4 (Résonance simple). *Supposons $\dim \mathcal{K}_0 = 1$. On dira que la famille d'opérateur $(H(\epsilon))_{\epsilon \geq 0}$ possède une résonance en $\lambda_0 \in \mathbb{R}^*$ s'il existe*

- 1. un voisinage réel I de λ_0 ,*
- 2. un voisinage réel U de 0,*
- 3. un sous-espace vectoriel \mathcal{H}^+ dense de \mathcal{H} dont le dual est noté \mathcal{H}^- ,*

tels que

- a) $\forall \epsilon \in U, z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R} \mapsto (P^\perp H(\epsilon) P^\perp - z)^{-1}$ se prolonge sur I comme opérateur borné de \mathcal{H}^+ vers \mathcal{H}^- . Ce prolongement est lipschitz continue de constante $L(\epsilon) = o(\epsilon^{-2})$,*
- b) $\mathcal{K}_0 \subseteq \mathcal{H}^+$ et $H_1(\mathcal{K}_0) \subseteq \mathcal{K}_0$,*
- c) $\forall \epsilon \in U$, et pour toute valeurs propres (il peut ne pas y en avoir) $\mu(\epsilon) \in I$ de $H(\epsilon)$ le vecteur propre associé est dans \mathcal{H}^+ .*

TCSpec : Résonance pour Orth (1990)

Théorème 3 (Concentration spectrale - Orth (1990)). *Supposons que la famille d'opérateurs $(H(\epsilon))_{\epsilon \geq 0}$ possède une résonance en λ_0 .*

- 1. L'équation $z = \operatorname{Re}(B(z, \epsilon))$ possède une unique solution $\lambda(\epsilon)$ qui dépend continûment de ϵ . On note dans la suite $B(\epsilon) := B(\lambda(\epsilon), \epsilon) = \lambda(\epsilon) - i\Gamma(\epsilon)$.*
- 2. Soit $\delta(\epsilon)$ positif tel que si $\Gamma(\epsilon) = 0$ alors $\delta(\epsilon) = 0$, et tel que sinon on ait $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \max \left(\frac{\epsilon^2 L(\epsilon) \delta(\epsilon)}{\Gamma(\epsilon)}, \delta(\epsilon) \right) = 0$ et $\Gamma(\epsilon) = o(\delta(\epsilon))$. Soit $J(\epsilon) = [\lambda(\epsilon) - \delta(\epsilon), \lambda(\epsilon) + \delta(\epsilon)]$. On a st- $\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} E_\epsilon(J(\epsilon)) = P$.*

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) \neq 0$

Etape 1 : Utilisation du théorème de concentration spectrale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \right\rangle - \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(J(\epsilon)) \varphi_0 \right\rangle \right| = 0$$

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) \neq 0$

Etape 1 : Utilisation du théorème de concentration spectrale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \right\rangle - \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(J(\epsilon)) \varphi_0 \right\rangle \right| = 0$$

Etape 2 : Utilisation de la formule de Stone :

Lemme 1 (Absence de valeurs propres non voulues). *Si $\mu(\epsilon)$ est une valeur propre de $H(\epsilon)$ et appartient à I pour $\epsilon \in U$, alors $\mu(\epsilon) = \lambda(\epsilon)$. En particulier $\Gamma(\epsilon) = 0$. Réciproquement, si $\Gamma(\epsilon) = 0$ pour ϵ suffisamment petit alors $\lambda(\epsilon)$ est une valeur propre de $H(\epsilon)$*

$$\left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(J(\epsilon)) \varphi_0 \right\rangle = \frac{1}{\pi} \int_{J(\epsilon)} e^{-i\lambda t} \operatorname{Im} (B(\lambda, \epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda$$

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) \neq 0$

Etape 3 : Etude de convergence L1 de l'intégrale

Lemme 2. *Si $\Gamma(\epsilon) \neq 0$ alors*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{J(\epsilon)} (B(\lambda, \epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda - \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} (B(\epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda \right| = 0$$

Donc en particulier :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} \mathbf{1}_{J(\epsilon)} (B(\lambda, \epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda - \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} (B(\epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda \right| = 0$$

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) \neq 0$

Etape 3 : Etude de convergence L1 de l'intégrale

Lemme 2. *Si $\Gamma(\epsilon) \neq 0$ alors*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_{J(\epsilon)} (B(\lambda, \epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda - \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} (B(\epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda \right| = 0$$

Donc en particulier :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} \mathbf{1}_{J(\epsilon)} (B(\lambda, \epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda - \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} (B(\epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda \right| = 0$$

Etape 4 : Utilisation de la formule de Stone

$$\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{-i\lambda t} (B(\epsilon) - \lambda)^{-1} d\lambda = e^{-iB(\epsilon)t} E_B(\mathbb{R}) = e^{-iB(\epsilon)t} = e^{-i\lambda(\epsilon)t} e^{\Gamma(\epsilon)t}$$

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) = 0$

Etape 1 : Utilisation du théorème de concentration spectrale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle \right| = 0$$

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) = 0$

Etape 1 : Utilisation du théorème de concentration spectrale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle \right| = 0$$

Etape 2 : Utilisation de la formule de Stone :

Lemme 1 (Absence de valeurs propres non voulues). *Si $\mu(\epsilon)$ est une valeur propre de $H(\epsilon)$ et appartient à I pour $\epsilon \in U$, alors $\mu(\epsilon) = \lambda(\epsilon)$. En particulier $\Gamma(\epsilon) = 0$. Réciproquement, si $\Gamma(\epsilon) = 0$ pour ϵ suffisamment petit alors $\lambda(\epsilon)$ est une valeur propre de $H(\epsilon)$*

$$\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle = e^{-i\lambda(\epsilon)t} \langle \varphi_0, E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle$$

Preuve de la règle d'or de Fermi pour $\Gamma(\epsilon) = 0$

Etape 1 : Utilisation du théorème de concentration spectrale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \rangle - \langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle \right| = 0$$

Etape 2 : Utilisation d'un lemme:

Lemme 1 (Absence de valeurs propres non voulues). *Si $\mu(\epsilon)$ est une valeur propre de $H(\epsilon)$ et appartient à I pour $\epsilon \in U$, alors $\mu(\epsilon) = \lambda(\epsilon)$. En particulier $\Gamma(\epsilon) = 0$. Réciproquement, si $\Gamma(\epsilon) = 0$ pour ϵ suffisamment petit alors $\lambda(\epsilon)$ est une valeur propre de $H(\epsilon)$*

$$\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle = e^{-i\lambda(\epsilon)t} \langle \varphi_0, E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle$$

Etape 3 : Réutilisation du théorème de concentration spectrale :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left| e^{-i\lambda(\epsilon)t} \langle \varphi_0, \varphi_0 \rangle - e^{-i\lambda(\epsilon)t} \langle \varphi_0, E_\epsilon(\{\lambda(\epsilon)\}) \varphi_0 \rangle \right| = 0$$

Conclusion de la preuve :

Pour les deux cas on a montré la règle d'or de Fermi:

$$\left| \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \right\rangle \right|^2 = e^{2\Gamma(\epsilon)t} + o_\epsilon(1)$$

Conclusion de la preuve :

Pour les deux cas on a montré la règle d'or de Fermi:

$$\left| \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \right\rangle \right|^2 = e^{2\Gamma(\epsilon)t} + o_\epsilon(1)$$

Calcul de $\Gamma(\epsilon)$?

Conclusion de la preuve :

Pour les deux cas on a montré la règle d'or de Fermi:

$$\left| \left\langle \varphi_0, e^{-iH(\epsilon)t} \varphi_0 \right\rangle \right|^2 = e^{2\Gamma(\epsilon)t} + o_\epsilon(1)$$

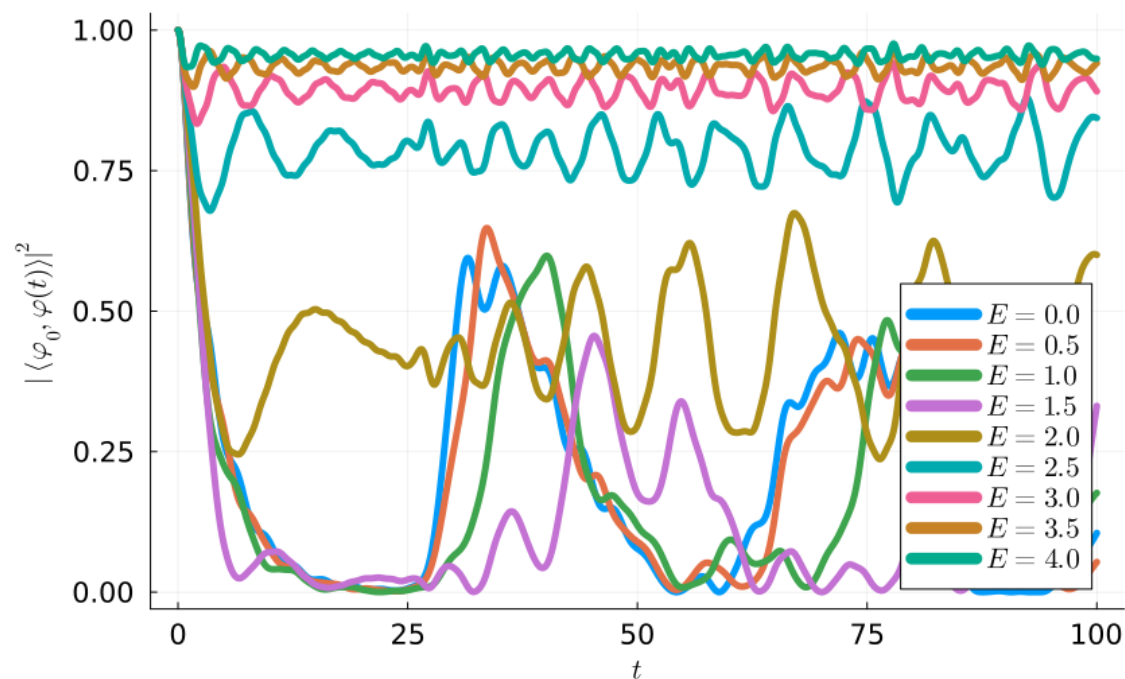
Calcul de $\Gamma(\epsilon)$? Exemple de la chaîne 1D connecté à un site :

$$\text{Résoudre : } z = \text{Re} \left(E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - z)^{-1} e_{R_0} \right) = E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - z)^{-1} e_{R_0} \longrightarrow \lambda(\epsilon)$$

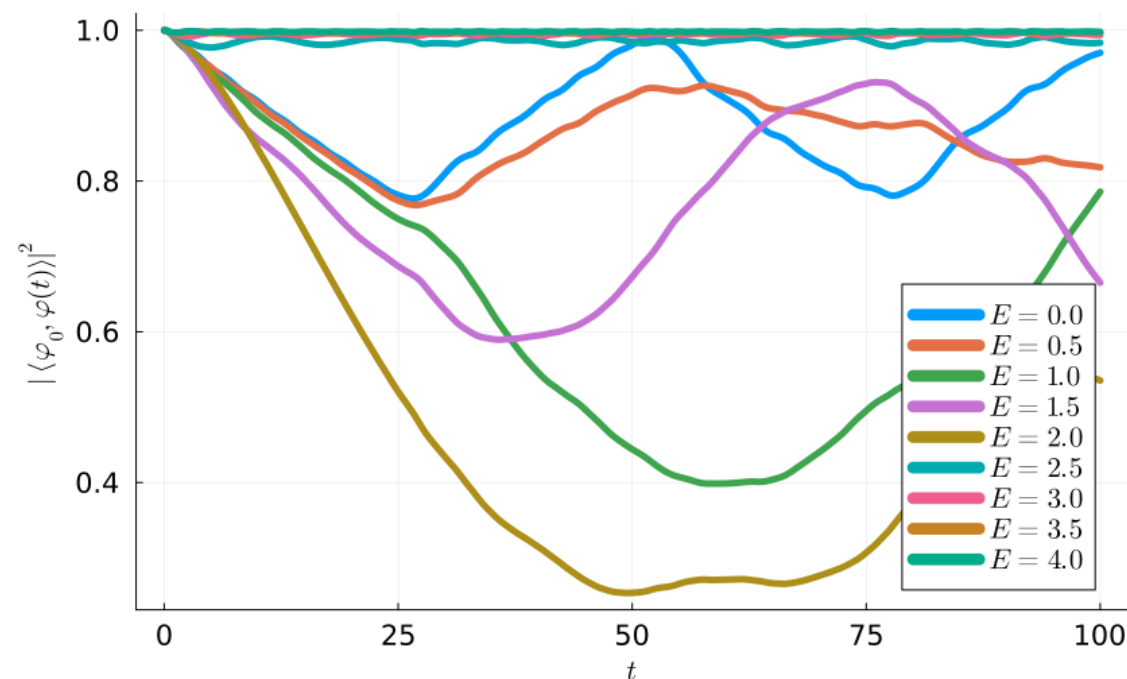
$$\text{Puis prendre la partie imaginaire : } \Gamma(\epsilon) := \text{Im} \left(E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - \lambda(\epsilon))^{-1} e_{R_0} \right) = 0 \quad !$$

Règle d'or de Fermi pour la chaîne 1D ?

Règle d'or de Fermi selon la valeur de E pour la chaîne 1D pour $\epsilon = 0.5$

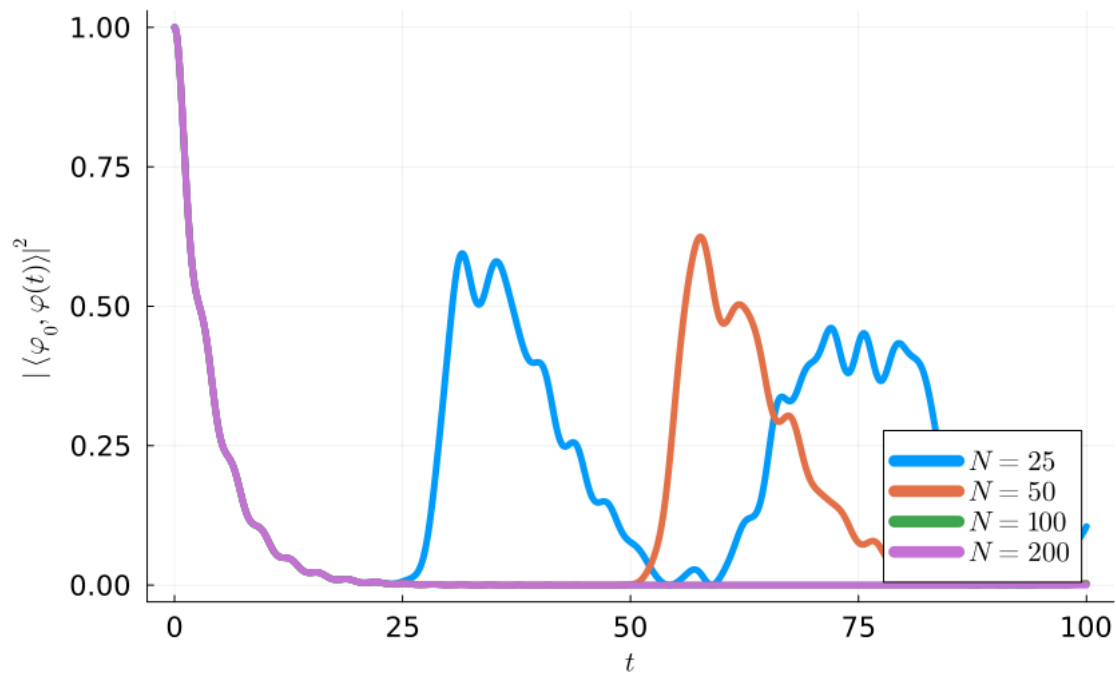


Règle d'or de Fermi selon la valeur de E pour la chaîne 1D pour $\epsilon = 0.1$

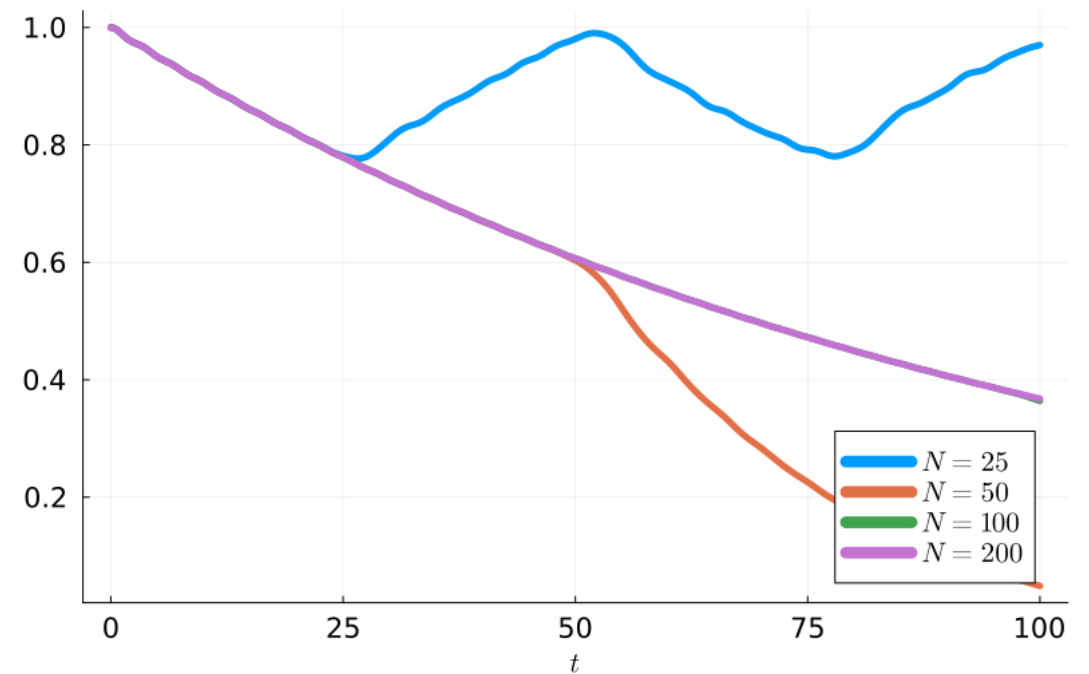


Règle d'or de Fermi pour la chaine 1D ?

Règle d'or de Fermi selon la valeur de N pour la chaine 1D pour $\epsilon = 0.5$



Règle d'or de Fermi selon la valeur de N pour la chaine 1D pour $\epsilon = 0.1$



Règle d'or de Fermi pour la chaîne 1D ?

Comment ça se fait ?

Règle d'or de Fermi pour la chaine 1D ?

Comment ça se fait ?

Le prolongement de la résolvante en des points du spectre possède une partie imaginaire !

Théorème de Sokhotski–Plemelj :

Théorème 4 (Sokhotski-Plemelj). *Soit f une fonction continue complexe sur l'intervalle $[a, b]$ avec $a < 0 < b$. Alors, on a la limite suivante :*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^b \frac{f(x)}{x - i\epsilon} dx = i\pi f(0) + \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx \quad (62)$$

où le symbole \mathcal{P} est la valeur principale de Cauchy.

Règle d'or de Fermi pour la chaine 1D ?

Comment ça se fait ?

Le prolongement de la résolvante en des points du spectre possède une partie imaginaire !

Théorème de Sokhotski–Plemelj :

Théorème 4 (Sokhotski-Plemelj). *Soit f une fonction continue complexe sur l'intervalle $[a, b]$ avec $a < 0 < b$. Alors, on a la limite suivante :*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^b \frac{f(x)}{x - i\epsilon} dx = i\pi f(0) + \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx \quad (62)$$

où le symbole \mathcal{P} est la valeur principale de Cauchy.

Règle d'or de Fermi pour la chaine 1D ?

Comment ça se fait ?

Le prolongement de la résolvante en des points du spectre possède une partie imaginaire !

Théorème de Sokhotski–Plemelj :

Théorème 4 (Sokhotski-Plemelj). *Soit f une fonction continue complexe sur l'intervalle $[a, b]$ avec $a < 0 < b$. Alors, on a la limite suivante :*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_a^b \frac{f(x)}{x - i\epsilon} dx = i\pi f(0) + \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx \quad (62)$$

où le symbole \mathcal{P} est la valeur principale de Cauchy.

Calcul de $\Gamma(\epsilon)$ pour la chaine 1D connectée

Calculons !

$$E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - z - i0^+)^{-1} e_{R_0} = E - \epsilon^2 \int_{-2}^2 \frac{e_{R_0}^* e_{R_0}}{\lambda - z - i0^+} dE_A(\lambda)$$

$$A = \int_{\sigma(A)} \lambda dE_A(\lambda)$$


$$f(A) = \int_{\sigma(A)} f(\lambda) dE_A(\lambda)$$

Calcul de $\Gamma(\epsilon)$ pour la chaine 1D connectée

Calculons !

$$E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - z - i0^+)^{-1} e_{R_0} = E - \epsilon^2 \int_{-2}^2 \frac{e_{R_0}^* e_{R_0}}{\lambda - z - i0^+} dE_A(\lambda)$$

Théorème de Radon-Nikodym


$$= E - \epsilon^2 \int_{-2}^2 \frac{p_A(\lambda)}{\lambda - z - i0^+} d\lambda$$

$$dE_A(\lambda) = p_A(\lambda) d\lambda$$

Calcul de $\Gamma(\epsilon)$ pour la chaine 1D connectée

Calculons !

$$\begin{aligned} E - \epsilon^2 e_{R_0}^* (A - z - i0^+)^{-1} e_{R_0} &= E - \epsilon^2 \int_{-2}^2 \frac{e_{R_0}^* e_{R_0}}{\lambda - z - i0^+} dE_A(\lambda) \\ &= E - \epsilon^2 \int_{-2}^2 \frac{p_A(\lambda)}{\lambda - z - i0^+} d\lambda \\ &= E - \epsilon^2 \int_{-2+z}^{2+z} \frac{p_A(\lambda + z)}{\lambda - i0^+} d\lambda \\ &= \left(E - \epsilon^2 \mathcal{P} \int_{-2}^2 \frac{p_A(\lambda)}{\lambda - z} d\lambda \right) + i\pi \epsilon^2 p_A(z). \end{aligned}$$

Théorème de
Sokhotski–Plemelj



Calcul de $\Gamma(\epsilon)$ pour la chaine 1D connectée

Etape 1 : Résoudre

$$z = E - \epsilon^2 \mathcal{P} \int_{-2}^2 \frac{p_A(\lambda)}{\lambda - z} d\lambda$$

Calcul de $\Gamma(\epsilon)$ pour la chaine 1D connectée

Etape 1 : Résoudre :

$$z = E - \epsilon^2 \mathcal{P} \int_{-2}^2 \frac{p_A(\lambda)}{\lambda - z} d\lambda$$

$$\lambda(\epsilon) = E + o(\epsilon)$$

Calcul de $\Gamma(\epsilon)$ pour la chaine 1D connectée

Etape 1 : Résoudre :

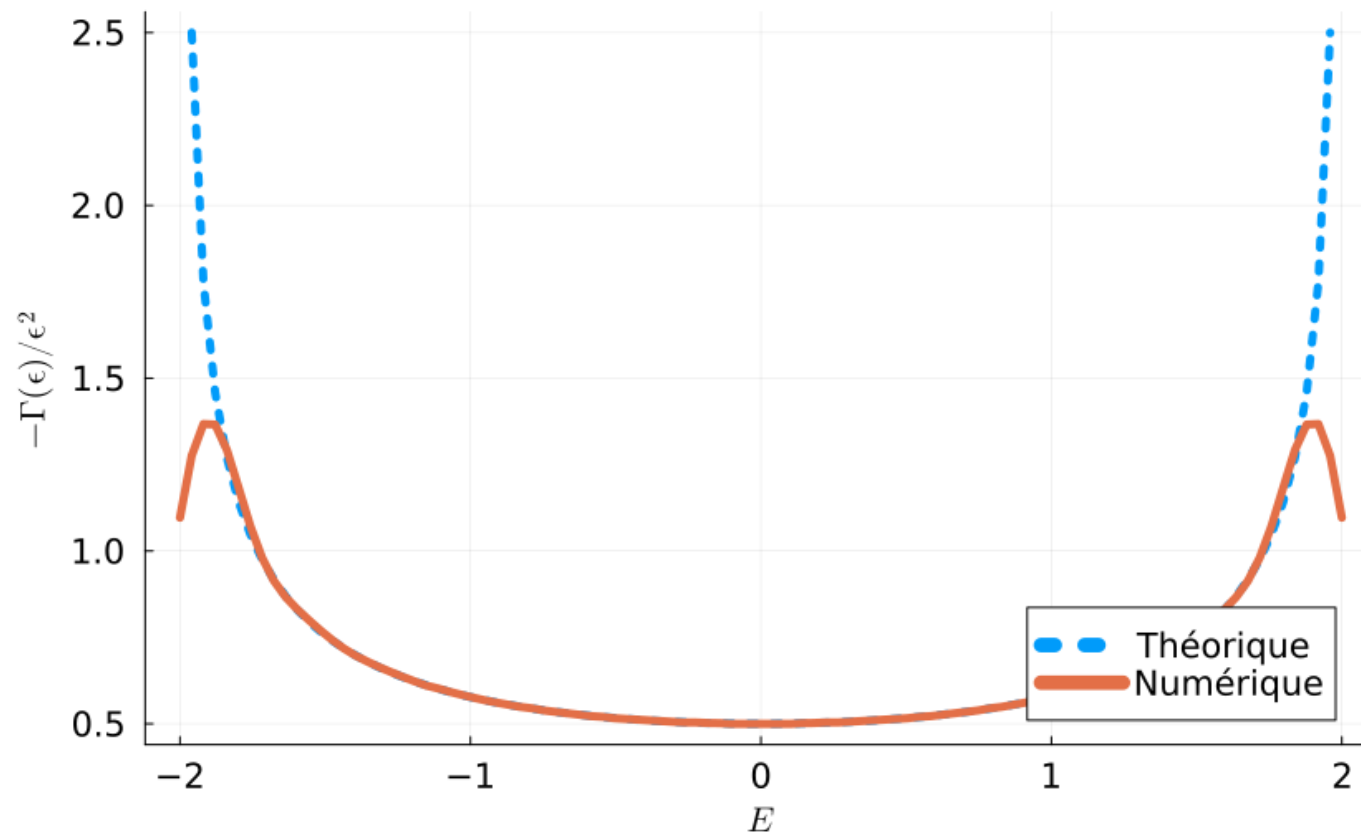
$$z = E - \epsilon^2 \cancel{\mathcal{P} \int_{-2}^2 \frac{p_A(\lambda)}{\lambda - z} d\lambda} \quad \lambda(\epsilon) = E + o(\epsilon)$$

Etape 2 : Calculer $\Gamma(\epsilon)$: $\Gamma(\epsilon) = -\epsilon^2 \pi p_A(E) + o(\epsilon^2)$

$$\Gamma(\epsilon) = -\epsilon^2 \frac{1}{2\sqrt{1 - \frac{E^2}{4}}} + o(\epsilon^2)$$

Comparaison théorie-numérique

$-\Gamma(\epsilon)/\epsilon^2$ selon la valeur de la valeur propre initial E



Conclusion

- **Etude l'approche par les résonances**
 - Matrice de Livsic, théorème de concentration spectrale
 - Preuve de la règle d'or de Fermi
 - Vu un exemple d'application : le système formé d'une chaîne connecté à un site avec un exemple de calcul du coefficient de décroissance.
 - Ecrire un code pour montrer numériquement la règle d'or de Fermi et calculer le coefficient de décroissance pour le cas de la chaîne.
- **Projet bien apprécié**
- **Intéressant de découvrir le monde de la physique-mathématique**

Bibliographie

- [How75] James S HOWLAND. « The Livsic matrix in perturbation theory ». In : *Journal of Mathematical Analysis and Applications* 50.2 (1975), p. 415-437. ISSN : 0022-247X. DOI : [https://doi.org/10.1016/0022-247X\(75\)90032-3](https://doi.org/10.1016/0022-247X(75)90032-3). URL : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022247X75900323>
- [Lev23] Antoine LEVITT. *Mathematical methods in quantum mechanics*. 2023. URL : <https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~antoine.levitt/MMQM/>.
- [Non23] Stéphane NONNENMACHER. *Lecture Notes for the course Introduction to Spectral Theory*. 2023. URL : <https://www.imo.universite-paris-saclay.fr/~stephane.nonnenmacher/enseign/Enseignement.html>.
- [Ort90] Andreas ORTH. « Quantum mechanical resonance and limiting absorption : the many body problem ». In : *Communications in Mathematical Physics* 126.3 (1990), p. 559-573.