LE JOURNAL DE PHYSIQUE-LETTRES

Classification
Physics Abstracts

02.00 — 03.65 — 21.60 — 24.10

UNE NOUVELLE APPROXIMATION POUR LES SYSTÈMES QUANTIQUES DÉPENDANT DU TEMPS

T. F. HAMMANN et M. FELLAH

Division de la Physique Théorique, Centre des Sciences et de la Technologie Nucléaires,
BP 1017, Alger Gare, Alger, Algérie

(Reçu le 3 mars 1978, accepté le 11 avril 1978)

Résumé. — Nous proposons une nouvelle méthode de résolution des systèmes quantiques dépendant du temps.

L'équation intégrale de type Volterra, équivalente à l'équation de Schrödinger, est transformée approximativement en équation de type Fredholm, comportant un nombre infini de termes, mais soluble. La méthode est appliquée à deux situations typiques de la Physique Nucléaire.

Abstract. — We propose a new approach for treating time dependent quantum systems.

The Volterra type integral equation, which is equivalent to the Schrödinger equation, is approximately transformed in a soluble Fredholm type equation, containing an infinite number of terms. The method is then applied to two typical Nuclear Physics problems.

Un grand nombre d'interactions physiques dépendent explicitement du temps et sinon elles n'existent, en général, que durant un intervalle de temps fini, ce qui est encore en fait une dépendance par rapport au temps. Les méthodes les plus utilisées pour traiter les phénomènes dépendant du temps sont la méthode de la variation des constantes de Dirac et la méthode des fonctions de Green dépendant du temps. Des considérations de causalité fournissent des informations analytiques supplémentaires [1], spécialement dans la théorie des collisions dépendant du temps et la théorie des champs. Le réarrangement chronologique de Dyson [2] permet d'obtenir sous forme compacte la solution itérative, de type Liouville-Neumann, de l'équation intégrale de l'opérateur d'évolution :

$$U(t, 0) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H(t_1) U(t_1, 0) dt_1. \quad (1)$$

Les termes de cette série, d'ordre supérieur à 1 ou 2, sont dans la pratique difficiles à calculer. Nous proposons dans ce travail une nouvelle approximation valable pour tout système dépendant du temps.

1. Exposé de la méthode. — L'équation de Volterra (1) admet une solution unique donnée par la série itérative usuelle. Une solution approchée peut

être obtenue de la façon suivante : On cherche un développement aussi exact que possible de la forme

$$\sum_v \sigma_v(t) s_v^*(t_1), \quad (2)$$

pour la fonction saut $S(t - t_1)$ de Heaviside. On peut toujours trouver un tel développement (2) pour toute fonction continue $S_\varepsilon(t - t_1)$ telle que $S_\varepsilon \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} S$, par exemple

$$S_\varepsilon(x) = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{th} \frac{x}{\varepsilon} \right)$$

ou

$$S_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \left[\operatorname{Arctg} \frac{x}{\varepsilon} + \frac{\pi}{2} \right].$$

ε pourra alors être pris arbitrairement petit mais non nul. Il est facile de voir qu'on a alors :

$$U(t, 0) = 1 + \sum_v \sigma_v(t) A_v(\mathbf{r}), \quad (3)$$

$$A_v = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty s_v^*(t_1) H(t_1) U(t_1, 0) dt_1.$$

La différence entre les courbes S et S_ε correspond, pour $t > t_1$, à une extinction adiabatique de l'interac-

tion, et pour $t < t_1$ à une légère non-causalité. Ces deux effets peuvent être rendus arbitrairement petits.

Soient **A** et **B** les vecteurs de composantes A_ν et B_ν , et soit M la matrice d'éléments $M_{\mu\nu}$, avec

$$B_\mu = \int_0^\infty s_\mu^*(t) H(t) dt$$

et

$$M_{\mu\nu} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty s_\mu^*(t) H(t) \sigma_\nu(t) dt,$$

alors $\mathbf{A} = \frac{1}{1-M} \mathbf{B}$. L'opérateur d'évolution est alors donné par l'équation (3).

L'approximation a une double origine : la troncature obligatoire de la série (2) et l'impossibilité de rendre ε nul. Ces difficultés mathématiques seront analysées dans une publication ultérieure plus détaillée.

Remarquons que dans le cas physiquement important d'un Hamiltonien périodique dans le temps, $H(t+T) = H(t)$, on a

$$U(t+T, 0) = U(t, 0) U(T, 0). \quad (4)$$

Il suffit, en effet, de réécrire l'équation (1) pour $U(t+T, T)$, de faire le changement de variable $s = t_1 - T$, et d'utiliser la périodicité de H , pour voir que $U(t+T, T)$ et $U(t, 0)$ satisfont à la même équation intégrale. L'unicité de la solution entraîne alors leur égalité. En multipliant cette égalité à droite par $U(t, 0)$ on obtient le résultat (4). Ce théorème a déjà été établi par Saltzman [3] qui cependant a utilisé le développement explicite, supposé convergent, de l'opérateur d'évolution. Nous appliquons dans ce qui suit le principe ébauché dans ce paragraphe, à des situations physiquement importantes : on transforme l'équation intégrale de Volterra en une équation de type Fredholm contenant une série infinie ; quand le noyau est séparable, la solution est alors immédiate [4-6].

2. Méthode de Dirac. — Nous nous proposons de combiner ici notre méthode à celle de la variation de la constante de Dirac. On suppose entièrement résolu le problème aux valeurs propres pour la partie indépendante du temps, H_0 , de l'hamiltonien total H du système :

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(\mathbf{r}, t) = H_0 \phi_n(\mathbf{r}, t); \quad H_0 \phi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \phi_n(\mathbf{r}) \quad (6)$$

$$\phi_n(\mathbf{r}, t) = \exp\left(-i \frac{\varepsilon_n}{\hbar} t\right) \phi_n(\mathbf{r}).$$

En représentation de Schrödinger, la fonction propre de H est prise sous la forme habituelle :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) \phi_n(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

ce qui donne :

$$\dot{a}_m(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n(t) V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

où nous avons posé $V_{mn}(t) = \langle \phi_m | V(t) | \phi_n \rangle$ et $\hbar\omega_{mn} = \varepsilon_m - \varepsilon_n$. On en déduit aisément, en fonction de l'état initial i :

$$a_m(t) = \delta_{mi} + \frac{1}{i\hbar} \sum_\nu \sigma_\nu(t) K_\nu^m$$

avec

$$K_\nu^m = \int_0^\infty s_\nu^*(t_1) \sum_n a_n(t_1) V_{mn}(t_1) e^{i\omega_{mn}t_1} dt_1.$$

Les coefficients K_ν^m satisfont à la relation algébrique :

$$K_\mu^p = C_\mu^{p(i)} + \frac{1}{i\hbar} \sum_\nu \sum_m D_{\mu\nu}^{pm} K_\nu^m,$$

avec les définitions :

$$C_\mu^{p(i)} = \int_0^\infty s_\mu^*(t) V_{pi}(t) e^{i\omega_{pi}t} dt$$

$$D_{\mu\nu}^{pm} = \int_0^\infty s_\mu^*(t) V_{pm}(t) e^{i\omega_{pm}t} \sigma_\nu(t) dt.$$

Les quantités $C_\mu^{p(i)}$ et $D_{\mu\nu}^{pm}$ sont aisément calculables, mais du fait de la présence sous le signe d'intégration de la différence d'énergies ω_{pm} , on n'obtient pas une expression matricielle simple pour les K_μ^p . Cette situation inconfortable disparaît dans la représentation d'interaction de Dirac-Schwinger.

3. Représentation intermédiaire. — Soit U_0 l'opérateur d'évolution correspondant à la partie indépendante du temps, H_0 , de l'hamiltonien (5). La fonction d'onde, en représentation intermédiaire, satisfait alors l'équation intégrale de type Volterra :

$$\psi_I(\mathbf{r}, t) = \psi_I(\mathbf{r}, 0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_I(t_1) \psi_I(\mathbf{r}, t_1) dt_1$$

où V_I est le transformé unitaire, par U_0 , de V .

On peut considérer qu'à l'instant $t = 0$, le système se trouvait dans l'état initial $\psi_s(\mathbf{r}, 0) \equiv \phi_i(\mathbf{r})$, état stationnaire et état propre de H_0 . En représentation de Schrödinger, on a donc :

$$\begin{aligned} \psi_s(\mathbf{r}, t) &= U_0(t, 0) \left[1 + \frac{1}{i\hbar} \sum_\nu \sigma_\nu(t) G_\nu(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) \equiv \\ &\equiv U(t, 0) \phi_i(\mathbf{r}) \quad (8) \end{aligned}$$

$$G_\nu(\mathbf{r}) = \int_0^\infty s_\nu^*(t_1) U_0^\dagger(t_1, 0) V(\mathbf{r}, t_1) U(t_1, 0) dt_1.$$

La méthode exposée au début de ce travail nous conduit alors à

$$G_{\mu}(\mathbf{r}) = F_{\mu}(\mathbf{r}) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\nu} D_{\mu\nu}(\mathbf{r}) \cdot G_{\nu}(\mathbf{r})$$

où

$$F_{\mu}(\mathbf{r}) = \int_0^{\infty} s_{\mu}^*(t) V_1(\mathbf{r}, t) dt$$

$$D_{\mu\nu}(\mathbf{r}) = \int_0^{\infty} s_{\mu}^*(t) V_1(\mathbf{r}, t) \sigma_{\nu}(t) dt .$$

Si $\mathbf{G}$ et D sont respectivement les vecteur et matrice d'éléments G_{μ} et $D_{\mu\nu}$, les coefficients G_{ν} sont donnés par

$$\mathbf{G} = \frac{1}{1 - \frac{1}{i\hbar} D} \mathbf{F} .$$

La fonction d'onde et l'opérateur d'évolution sont alors connus par l'équation (8).

Soit φ_f un état propre arbitraire de H_0 ; l'amplitude de probabilité de transition de φ_i vers φ_f sous l'influence de V , est simplement

$$\begin{aligned} \langle \varphi_f | U(t, 0) | \varphi_i \rangle &= \langle \varphi_f | \psi(t) \rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \exp\left(-i \frac{\varepsilon_f}{\hbar} t\right) \sum_{\nu} \langle \varphi_f | \sigma_{\nu}(t) G_{\nu} | \varphi_i \rangle , \end{aligned}$$

où la quantité physiquement importante est l'élément de matrice de G_{ν} entre les états initial et final.

La méthode exposée ci-dessus semble appropriée dans un grand nombre de domaines de la physique des phénomènes quantiques dépendant du temps.

Bibliographie

- [1] HILGEWOOD, J., *Dispersion Relations and Causal Description* (North-Holland, Amsterdam) 1960.
- [2] DYSON, F. J., *Phys. Rev.* **75** (1949) 486.
- [3] SALTZMAN, W. R., *Phys. Rev. A* **10** (1974) 461.
- [4] HAMMANN, T. F., OBERLECHNER, G., TRAPP, G. et YOCOZ, J., *J. Physique* **28** (1967) 755 ;
- HAMMANN, T. F., HO-KIM, Q., *Nuovo Cimento* **64B** (1969) 356 ;
- HAMMANN, T. F., HO-KIM, Q., *Nuovo Cimento* **64B** (1969) 367.
- [5] DESGROLARD, P., HAMMANN, T. F., *Phys. Rev. C* **6** (1972) 482 ;
- Phys. Rev. C* **8** (1973) 888.
- [6] HAMMANN, T. F., DESGROLARD, P. and CHETOUANI, L., *Nuovo Cimento* **29A** (1975) 199.