



HAL
open science

Contrôle quantique adiabatique: technique de passage adiabatique parallèle et systèmes dissipatifs

Ghassen Dridi

► **To cite this version:**

Ghassen Dridi. Contrôle quantique adiabatique: technique de passage adiabatique parallèle et systèmes dissipatifs. Autre [cond-mat.other]. Université de Bourgogne, 2011. Français. NNT: 2011DI-JOS044 . tel-00692406

HAL Id: tel-00692406

<https://theses.hal.science/tel-00692406>

Submitted on 30 Apr 2012

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Université de Bourgogne



Thèse

présentée par

Ghassen DRIDI

pour obtenir le titre de
DOCTEUR en PHYSIQUE

CONTRÔLE QUANTIQUE ADIABATIQUE: TECHNIQUE DE PASSAGE ADIABATIQUE PARALLÈLE ET SYSTÈMES DISSIPATIFS

le 16 Décembre 2011

devant la commission d'examen composée de :

A. JOYE	Professeur (Université Joseph Fourier, Grenoble)	Rapporteur
N. VITANOV	Professeur (Université de Sofia, Bulgarie)	Rapporteur
D. VIENNOT	Maître de conférence (Université de Franche-Comté, Besançon)	Examineur
H. ELEUCH	Chercheur (Max Plank Institute, Dresde, Allemagne)	Examineur
S. GUÉRIN	Professeur (Université de Bourgogne)	Directeur de thèse
H.R. JAUSLIN	Professeur (Université de Bourgogne)	Examineur

Institut Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne – Université de Bourgogne

UMR 6303 CNRS

BP 47870 – 21078 Dijon – France

En préambule à cette thèse, je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qui m'ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration de cette thèse ainsi qu'à la réussite de ces formidables trois années.

Tout d'abord, je tiens à remercier vivement Stéphane Guérin, mon directeur de thèse, pour m'avoir initié au monde de la recherche et qui s'est toujours montré à l'écoute et très disponible tout au long de la réalisation de cette thèse, ainsi pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'il a bien voulu me consacrer.

Mes remerciements s'adressent également à Mr Hans Jauslin, qui, en tant que directeur de l'École Doctorale, m'a offert l'opportunité de rejoindre l'équipe de dynamique quantique non-linéaire, mais également pour avoir participé à la lecture et à la correction de mon manuscrit.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance envers A. Joye, N. Vitanov, D. Viennot et H. Eleuch, qui ont eu la gentillesse d'avoir accepté de faire partie des membres de jury et d'avoir lu et critiqué de manière pertinente mon travail.

J'exprime ma gratitude à tous les thésards que j'ai pu côtoyer durant ma thèse et plus particulièrement mes colocataires de bureau à savoir, Matthieu, Elie, Marc et Vahe qui m'ont permis de passer trois superbes années.

Enfin, je n'oublie pas mes parents et mes soeurs Sonia et Imen pour leur contribution, leur soutien et leur patience.

Table des matières

Introduction	1
1 Évolution adiabatique d'un système quantique	5
1.1 Théorème adiabatique	5
1.2 Évolution adiabatique d'un système quantique à deux niveaux	7
1.3 Conséquence du passage adiabatique : presque-croisement et transitions	9
1.4 Phase géométrique de Berry	11
1.5 Passage adiabatique par effet Raman stimulé (STIRAP)	13
1.5.1 Système et Hamiltonien effectif	14
1.5.2 Évolution adiabatique du système	15
1.5.3 Robustesse	17
1.6 Optimisation du passage adiabatique	18
1.6.1 Formule de Dykhne-Davis-Pechukas (DDP)	19
1.6.2 Points de Transition et lignes de Stokes	20
1.6.3 Lignes de niveau dans l'espace des paramètres	20
1.7 Conséquences de la formule de Dykhne-Davis-Pechukas	22
1.8 Conclusion	25
A Étude des lignes de Stokes	29
2 STIRAP ultra-rapide par des impulsions lasers mises en forme	31
2.1 Passage adiabatique parallèle dans un système en Λ	32
2.1.1 Système et Hamiltonien effectif	32
2.1.2 Construction des valeurs propres instantanées parallèles	32
2.1.3 Implémentation numérique	36
2.2 Comparaison avec le stirap conventionnel	36
2.3 Robustesse du passage adiabatique parallèle	38
2.4 Implémentation du stirap parallèle par des impulsions ultra-courtes mises en forme	41
2.5 Conclusion et discussions	45
3 Dynamique des systèmes quantiques ouverts	47
3.1 Équation de Lindblad et Hamiltonien effectif non-Hermitien	48
3.2 Vecteurs et valeurs propres du système	51
3.2.1 Cas d'un couplage réel	51
3.2.2 Cas d'un couplage complexe	52
3.3 Couplage d'un état discret à un continuum	53

3.4	Conclusion	56
B	L'angle complexe θ	59
4	Passage adiabatique dans le plan complexe : Application aux systèmes quantiques dissipatifs à deux niveaux.	63
4.1	Le modèle	64
4.1.1	Définition	64
4.1.2	Les bases adiabatiques du système	64
4.1.3	Connections initiales du système	66
4.2	Méthode des temps complexes	67
4.2.1	Définitions générales et hypothèses	67
4.2.2	Comportement asymptotique des lignes de Stokes	68
4.2.3	Cas générique - Connection à la valeur propre la moins dissipative	70
4.2.4	Chemin dissipatif	74
4.2.5	Cas générique avec connexion au vecteur propre le plus dissipatif	77
4.2.6	Cas non générique	78
4.2.7	Choix de la ligne de Stokes et les points de transition	83
4.2.8	Comportement asymptotique des probabilités de transition	83
4.3	Applications: Le modèle Allen-Eberly dissipatif	84
4.3.1	Cas d'une dissipation dépendante du temps	84
4.3.2	Cas d'une dissipation constante	89
4.4	Application au modèle Rosen Zener dissipatif	93
4.5	Conclusion	97
C	Preuve de la formule (4.77)	99
D	Formule pour $\theta_{\pm}(0 \eta_0)$	103
5	Passage adiabatique pour les systèmes quantiques dissipatifs à deux niveaux : Formulation, processus superadiabatique et topologie	105
5.1	Introduction	105
5.2	Topologie du passage adiabatique	106
5.3	Passage adiabatique et l'analyse superadiabatique	111
5.3.1	Modèle sans croisement d'énergies	113
5.3.2	Modèle avec croisement d'énergies	118
5.4	Au-delà des bases adiabatique : les bases superadiabatiques	120
5.4.1	Méthode itérative	120
5.4.2	Les bases superadiabatiques de Berry	122
5.5	Histoire des transitions non-adiabatiques dans les bases superadiabatiques de Berry	123
5.6	Histoire des transitions non-adiabatiques dans les bases superadiabatiques itératives	127
5.7	Conclusion	129

6	Conclusion, discussion et perspectives	131
6.1	Conclusion	131
6.2	Discussion	132
6.3	Perspectives	133

Introduction

EN 1917, Albert Einstein a établi les principes de base qui régissent l'interaction de la matière avec la lumière. Il a postulé que le mécanisme d'interaction entre le rayonnement et un système atomique caractérisé par ses niveaux d'énergie discrets peut être décrit par les processus d'absorption, d'émission spontanée et d'émission stimulée. Einstein a paramétrisé ces mécanismes par des coefficients traduisant les probabilités de chacun, connus sous le nom des coefficients d'Einstein. Ces principes ont permis par la suite à la création du laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation).

Depuis lors, ces sources lasers ont connu un développement considérable. De nos jours, le laser est plus généralement vu comme une source possible pour tout rayonnement électromagnétique. Les longueurs d'ondes concernées étaient d'abord les micro-ondes (maser), puis elles se sont étendues aux domaines de l'infrarouge, du visible et l'ultraviolet. L'avantage de ces sources lasers est la *cohérence* temporelle et spatiale ainsi que l'intensité de la lumière qu'elles émettent. Ces propriétés de *cohérence* ont ensuite été largement utilisées pour développer des techniques de plus en plus sophistiquées permettant le *contrôle* et la manipulation des états internes des atomes.

Le contrôle cohérent se manifeste plus particulièrement au contrôle des transitions atomiques par des impulsions lasers. Ces transferts partiels ou complets de population entre un état initial et un état cible sont au coeur de plusieurs processus quantiques [1] allant de la chimie [2], l'optique quantique et l'information quantique permettant par exemple l'implémentation de portes quantiques [3] qui se formule par le contrôle des opérateurs d'évolution caractérisant l'interaction des atomes avec les champs lasers.

Plusieurs techniques permettent un transfert complet de population. Certaines méthodes de type impulsion- π nécessitent un contrôle très précis de l'aire totale de l'impulsion laser et ne sont donc pas robustes vis-à-vis des fluctuations des paramètres du champ laser. Il existe d'autres techniques plus robustes, basées sur *le passage adiabatique* et qui permettent à la dynamique de suivre continûment un seul état. Elles sont souvent utilisées pour mettre en oeuvre ces transferts en raison de leur robustesse par rapport aux fluctuations des champs lasers et à la connaissance imparfaite du système étudié. En particulier, les développements qu'ont connus les sources lasers ont permis aux techniques de passage adiabatique d'être au coeur de nombreux processus quantiques. Nous nous intéresserons à ce type de processus, où seul le contrôle des phases relatives des lasers et de leur polarisation est requis de façon précise, ce qui est expérimentalement réalisable avec les technologies modernes.

Le passage adiabatique est une conséquence du concept du théorème adiabatique en mécanique quantique énoncé en 1928 par Max Born et Vladimir Fock [4]. Le théorème adiabatique établit en particulier que, dans une limite d'évolution infiniment lente, si le système est initialement préparé dans un état propre $H(t_i)$, alors il passe à chaque instant t par l'état propre instantané de l'Hamiltonien $H(t)$. Dans la pratique, il suffit que l'aire de l'impulsion laser

soit suffisamment grande pour satisfaire avec une grande précision le suivi adiabatique. Cette propriété en fait une technique robuste. La description de la réalisation expérimentale est de ce point de vue plus réaliste puisque les paramètres du champ laser fluctuent en général.

Outre la preuve formelle du théorème adiabatique, une étape importante pratique consiste à la détermination des *corrections non-adiabatiques* à la fin d'une interaction caractérisée par une impulsion permettant d'identifier les états propres du système au début et à la fin de l'interaction comme les états libres du système. Ainsi, peut après l'invention du théorème adiabatique, Dykne, Davis et Pechukas [5, 6] ont établi une formule (connue sous le nom de la formule DDP) qui calcule ces pertes non-adiabatiques. Ils affirment plus précisément que la probabilité de transition non-adiabatique à la fin de l'interaction entre les états propres d'un système à deux niveaux décroît exponentiellement dans la limite adiabatique comme e^{-TC} , où T est le temps caractéristique de l'interaction pris assez grand dans la limite adiabatique (*i.e.* $T \rightarrow +\infty$) et C est une constante positive. Ce résultat généralise la formule Landau Zener à des formes quelconques d'impulsion (mais analytiques). L'analyse de cette formule a permis en particulier l'*optimisation* du passage adiabatique. Ainsi le concept du *passage adiabatique parallèle* [7] établi que si la dynamique suit des *lignes de niveau* dans *l'espace des paramètres*, c'est-à-dire des trajectoires dans l'espace des paramètres pour lesquelles la différence entre les valeurs propres du système est constante à chaque instant, alors les corrections non-adiabatiques données par la formule DDP tendent vers zéro et conduisent en général à un transfert de population avec une grande précision pour une aire d'impulsion relativement modeste tout en étant *robuste*. Récemment, des études de robustesse sur la stratégie du passage adiabatique parallèle ont été réalisées dans la référence [8] et ont confirmé son efficacité.

L'étude de la décohérence et des processus plus généralement dissipatifs dus à l'interaction du système avec son environnement, constitue de nos jours l'une des études modernes de la mécanique quantique, car ils représentent les obstacles principaux pour les applications pratiques tel que le domaine de l'information quantique. Toutefois, dans la limite où la dissipation conduit la population à l'extérieur du système considéré, il est possible de décrire ces effets dissipatifs par un Hamiltonien effectif non hermitien ne tenant compte que les effets dominants de la dynamique. La dynamique du système donnée par l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien effectif est alors beaucoup plus simple à analyser. Cependant, étendre le processus adiabatique à ces systèmes ouverts décrits par des Hamiltoniens non hermitiens est non trivial. En effet, l'obstacle principal à l'existence de l'approximation adiabatique est lié à l'apparition des valeurs propres complexes. Il est connu plus particulièrement que l'approximation adiabatique, sous sa forme standard, existe seulement lorsque le système suit la valeur propre la moins dissipative [9], autrement dit, la valeur propre contenant la partie imaginaire la plus grande (en valeur absolue). Dans l'autre cas, lorsque la dynamique suit l'état le plus dissipatif, seule une faible dissipation permet la préservation de son existence. L'inexistence d'un théorème adiabatique lorsque cette condition n'est pas satisfaite est cruciale car elle empêche, en principe, son application aux processus de transfert de population qui s'accompagnent par un croisement des parties imaginaires des valeurs propres.

La thèse est organisée comme suit: Dans le premier chapitre, nous rappelons l'énoncée du théorème adiabatique et ses implications. En particulier, nous montrons la supériorité de la stratégie du passage adiabatique parallèle par rapport au passage adiabatique classique en terme d'efficacité du transfert de population et de robustesse.

Dans le deuxième chapitre, nous généralisons le concept du passage adiabatique parallèle à des systèmes à trois niveaux en Λ . Nous montrons en particulier comment cette technique

nous permet de combiner à la fois *l'efficacité énergétique des méthodes impulsions- π et la robustesse du passage adiabatique*. Cette technique est pratiquement réalisable en utilisant les outils modernes de mise en forme d'impulsions *ultra-courtes*.

Les systèmes dissipatifs à deux niveaux sont traités dans le troisième chapitre. Nous montrons en particulier que les effets de la dissipation sur le système peuvent dans certaines conditions s'exprimer par un Hamiltonien effectif dont le taux de perte de population de l'état excité est traité comme une partie imaginaire associée à cet état. Ce formalisme sera utilisé dans le chapitre quatre pour décrire l'évolution adiabatique d'un système dissipatif. En particulier, nous montrons comment l'usage de la méthode des temps complexes nous a permis d'étendre la formule DDP à des système dissipatifs à deux niveaux. Nous rappelons les principes de cette méthode et ses conditions telles qu'elles sont développées dans les références [38, 39, 90], puis nous décrivons les conditions permettant la généralisation de la méthode à des systèmes dissipatifs à deux niveaux.

Le cinquième chapitre est une conséquence du quatrième chapitre. En effet, nous allons formuler la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux dans la limite adiabatique qui est valide au-delà d'une faible dissipation.

Chapitre 1

Évolution adiabatique d'un système quantique

LA dynamique d'un système quantique non-dissipatif est déterminée de façon générale par l'équation de Schrödinger. La solution de cette équation dépend d'un temps T caractéristique du système, et permet une analyse simplifiée dans les deux cas limites où T tend vers zéro ou l'infini. Le second cas correspondant à l'évolution lente du système, de son état initial à son état final, est décrit dans le cadre du *théorème adiabatique*. Dans un problème où l'Hamiltonien $H(t)$ évolue lentement et continûment entre deux instants t_i et t_f , le théorème adiabatique établit que, dans une limite d'évolution infiniment lente (évolution adiabatique), si le système est initialement préparé dans un état propre de $H(t_i)$, alors il passe à chaque instant t par l'état propre instantané de $H(t)$ obtenu par continuité. Nous rappellerons l'énoncé de ce théorème et ses implications dans la première section. Dans la seconde sections nous montrons comment le passage adiabatique permet le contrôle des transitions atomiques. Enfin, nous allons développer une technique permettant l'optimisation du passage adiabatique. Ceci est traité dans la dernière section.

1.1 Théorème adiabatique

Considérons un système quantique dont l'Hamiltonien $H(t) = \hat{H}(t/T)$ évolue lentement et de façon continue dans le temps. La durée T caractérise cette évolution, une évolution adiabatique ayant lieu lorsque T tend vers l'infini. Nous notons par $E_1(t), E_2(t), \dots, E_n(t), \dots$ la suite des valeurs propres instantanées de l'Hamiltonien, de dégénérescence respective $d_1, d_2, \dots, d_n, \dots$, par $\{|\Psi_n^\alpha(t)\rangle\}_{\alpha=1, \dots, d_n}$ les vecteurs propres instantanés associés, et par $P_1(t), P_2(t), \dots, P_n(t), \dots$, les projecteurs sur les sous-espaces propres associés :

$$H|\Psi_n^\alpha(t)\rangle = E_n(t)|\Psi_n^\alpha(t)\rangle, \quad (1.1a)$$

$$\langle\Psi_n^\alpha(t)|\Psi_m^\beta(t)\rangle = \delta_{nm}\delta_{\alpha\beta}, \quad (1.1b)$$

$$P_n(t) = \sum_{\alpha=1}^{d_n} |\Psi_n^\alpha(t)\rangle\langle\Psi_n^\alpha(t)|. \quad (1.1c)$$

L'opérateur d'évolution du système $U(t, t_i)$, appelé *propagateur*, relie l'état du système $|\Psi(t)\rangle$ au temps t à l'état initial $|\Psi(t_i)\rangle$ par la relation

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_i)|\Psi(t_i)\rangle. \quad (1.2)$$

Si on suppose de plus que

- les valeurs propres instantanées ne se croisent pas *i.e.* $|E_n(t) - E_m(t)| > \delta_0 \forall t$,
- les dérivées $\frac{d}{dt}P_n$, $\frac{d^2}{dt^2}P_n$ sont définies et continues,

alors dans la limite où $T \rightarrow \infty$, l'opérateur d'évolution $U(t, t_i)$ possède la propriété asymptotique suivante [10]:

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad U(t, t_i)P_n(t_i) - P_n(t)U(t, t_i) = \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right). \quad (1.3)$$

Ainsi, les sous-espaces propres instantanés du système évoluent indépendamment les uns des autres. Autrement dit, si la fonction d'onde $\Psi(t)$ décrivant l'état du système appartient au sous-espace propre instantané d'énergie $E_n(t)$ au temps initial, alors cette fonction d'onde suit ce sous-espace propre au cours de l'évolution, dans la limite adiabatique $T \rightarrow \infty$. Dans le cas le plus simple où les valeurs propres ne sont pas dégénérées, le système évolue suivant les états propres auxquels il s'est connecté initialement :

$$|\Psi(t)\rangle \simeq \sum_n \langle \Psi_n(t_i) | \Psi(t_i) \rangle e^{-i(\phi_n^d(t) + \phi_n^g(t))} |\Psi_n(t)\rangle. \quad (1.4)$$

Les corrections non-adiabatiques à l'état $|\Psi(t)\rangle$ du système sont d'ordre $\mathcal{O}(\frac{1}{T})$. L'équation (1.4) se déduit directement du théorème adiabatique (1.3) que l'on applique sur $|\Psi(t)\rangle$

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t, t_i) |\Psi(t_i)\rangle \\ &= \sum_n U(t, t_i) P_n(t_i) |\Psi(t_i)\rangle \\ &= \sum_n P_n(t) U(t, t_i) P_n(t_i) |\Psi(t_i)\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right) \\ &= \sum_n |\Psi_n(t)\rangle \langle \Psi_n(t) | U(t, t_i) | \Psi_n(t_i) \rangle \langle \Psi_n(t_i) | \Psi(t_i) \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right). \end{aligned}$$

La quantité $\langle \Psi_n(t) | U(t, t_i) | \Psi_n(t_i) \rangle$, s'identifie à une phase accumulée lors de l'évolution adiabatique du système. En effet, on a $U(t, t_i) |\Psi_n(t_i)\rangle = P_n(t) U(t, t_i) |\Psi_n(t_i)\rangle$, il existe alors $\beta_n \in \mathbb{C}$, tel que $U(t, t_i) |\Psi_n(t_i)\rangle = \beta_n |\Psi_n(t)\rangle$. Comme $U(t, t_i)$ est un opérateur unitaire, on déduit alors que $|\beta_n| = 1$, ce qui implique la relation $\langle \Psi_n(t) | U(t, t_i) | \Psi_n(t_i) \rangle = \beta_n(t, t_i)$. On montre plus précisément que cette phase est la somme de la phase dynamique

$$\phi_n^d(t) = \frac{1}{\hbar} \int_{t_i}^t E_n(t) dt, \quad (1.5)$$

et de la phase géométrique [11]

$$\phi_n^g(t) = -i \int_{t_i}^t \langle \Psi_n(t) | \frac{d}{dt} | \Psi_n(t) \rangle dt. \quad (1.6)$$

Si l'Hamiltonien du système dépend du temps à travers des paramètres $\mathbf{R}(t)$, alors, la phase géométrique s'écrit

$$\phi_n^g = -i \int_{\mathbf{R}(t_i)}^{\mathbf{R}(t)} \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}, \quad (1.7)$$

avec la notation $|n(\mathbf{R})\rangle \equiv |\Psi_n(t)\rangle$.

L'écriture (1.7) montre la nature géométrique de la phase $\phi_n^g(t)$: elle dépend uniquement du

chemin parcouru dans l'espace des paramètres, et non du temps mis pour parcourir ce chemin. Nous étudierons dans la section (1.4) la phase géométrique plus en détail. Dans la pratique, il suffit que le temps caractéristique T soit suffisamment grand devant les autres grandeurs caractéristiques du système pour que l'approximation adiabatique décrive la dynamique d'une façon relativement précise. Les relations que doit alors satisfaire T s'appellent les *conditions d'adiabaticité*. Nous allons à présent esquisser une démonstration de ce théorème dans le cas d'un espace de Hilbert de dimension finie sans croisement des valeurs propres instantanées [4, 12, 13], et nous supposons de plus que les valeurs propres ne sont pas dégénérées. Le cas le plus général d'un espace de Hilbert de dimension infinie avec un croisement possible des valeurs propres instantanées est traité dans les références [4, 14–18].

1.2 Évolution adiabatique d'un système quantique à deux niveaux

Dans cette section nous allons esquisser une démonstration de ce théorème dans le cas d'un système quantique à deux niveaux. En particulier, nous allons montrer comment le passage adiabatique permet le *contrôle* des transitions entre les niveaux d'énergies. On considère un système fermé, où un laser de pulsation de Rabi $\Omega \geq 0$ présentant une enveloppe temporelle vérifiant $\Omega(\pm\infty) = 0$, couple l'état fondamental $|0\rangle$ à l'état excité $|1\rangle$ avec un écart à la résonance Δ (Figure 1.1). L'Hamiltonien du système s'écrit dans l'approximation des ondes tournantes (Rotating Wave approximation, RWA ou approximation résonante) et dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ (dans un système des unités où $\hbar = 1$)

$$H(t/T) \equiv H(\tau) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega(\tau) \\ \Omega(\tau) & 2\Delta(\tau) \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

où T est un temps caractéristique du système qui peut être la durée de l'impulsion laser par exemple. L'Hamiltonien (1.8) admet les valeurs propres

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}\Delta \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} \quad (1.9)$$

associées aux vecteurs propres normalisés

$$|\varphi_{+}\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}, \quad |\varphi_{-}\rangle = \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{bmatrix}, \quad (1.10)$$

où θ est l'angle dynamique défini par

$$\tan \theta = -\frac{\Omega}{\Delta}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (1.11)$$

On désigne par $|\psi(\tau)\rangle$ la fonction d'onde du système, solution de l'équation de Schrödinger

$$\frac{i}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} |\psi(\tau)\rangle = H(\tau) |\psi(\tau)\rangle. \quad (1.12)$$

Dans la suite, on suppose que le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_{+}\rangle$, *i.e.* $|\psi(-\infty)\rangle = |\varphi_{+}(-\infty)\rangle = |0\rangle$. Nous considérons en particulier le cas où l'écart à la résonance est initialement négative, *i.e.* $\Delta(-\infty) < 0$. En posant

$$|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = R^{\dagger}(\tau) |\psi(\tau)\rangle, \quad (1.13)$$

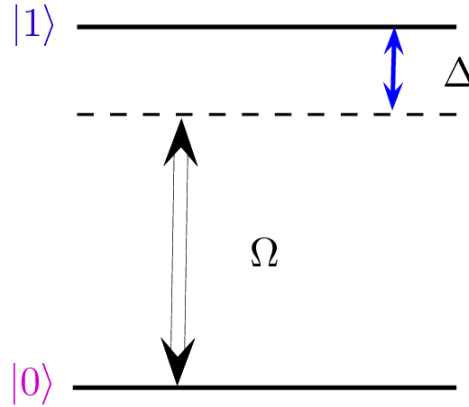


FIG. 1.1 – Schéma du système à deux niveaux utilisé. L'état de base $|0\rangle$ est couplé à l'état excité $|1\rangle$ par un laser de pulsation de Rabi Ω avec un écart à la résonance Δ .

où R est la transformation unitaire définie par

$$R(\tau) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad (1.14)$$

l'équation de Schrödinger (1.12) se réécrit

$$\frac{i}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} |\tilde{\psi}(\tau)\rangle = \left[D(\tau) - \frac{i}{T} R^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau) \right] |\tilde{\psi}(\tau)\rangle \quad (1.15a)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_+(\tau) & \frac{i}{T} \frac{\dot{\theta}(\tau)}{2} \\ -\frac{i}{T} \frac{\dot{\theta}(\tau)}{2} & \lambda_-(\tau) \end{pmatrix} |\tilde{\psi}(\tau)\rangle. \quad (1.15b)$$

Dans la limite adiabatique $T \rightarrow \infty$, les termes non diagonaux dans l'équation (1.15b) appelés aussi les termes de couplages non adiabatiques, peuvent être négligés devant leur écart en énergie $|\lambda_+ - \lambda_-|$. Ceci mène à la condition d'adiabaticité

$$|\lambda_+ - \lambda_-| \gg \left| \frac{\dot{\theta}}{T} \right|. \quad (1.16)$$

Dès lors que la condition d'adiabaticité (1.16) est vérifiée, l'équation de Schrödinger se résout facilement et la fonction d'onde prend la forme simple

$$|\psi(\tau)\rangle = \exp\left(-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_+(s) ds\right) |\varphi_+(\tau)\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right). \quad (1.17)$$

Ainsi dans la limite adiabatique, le système évolue en suivant l'état propre auquel il s'est connecté initialement. Notons que dans cet exemple la définition (1.10) des états propres instantanés assure automatiquement la condition de transport parallèle

$$\langle \varphi_\pm | \frac{\partial}{\partial \tau} | \varphi_\pm \rangle = 0, \quad (1.18)$$

pour laquelle la phase géométrique est nulle. La seule phase accumulée lors du suivi adiabatique du vecteur $|\varphi_+\rangle$ correspond alors à la phase dynamique définie comme l'intégrale de la valeur propre λ_+ et d'une éventuelle phase de Berry lorsque qu'une boucle dans l'espace des paramètres est considérée (voir section 1.4).

1.3 Conséquence du passage adiabatique : presque-croisement et transitions

Dans cette section, nous allons montrer comment à partir d'une condition initiale donnée, par exemple $|\psi(\tau \rightarrow -\infty)\rangle = |\varphi_+(-\infty)\rangle = |0\rangle$, l'évolution adiabatique du système produit asymptotiquement une transition $|\psi(\tau \rightarrow +\infty)\rangle = |\varphi_+(+\infty)\rangle = |1\rangle$, lorsque le couplage a la forme d'une enveloppe vérifiant $\Omega(\pm\infty) = 0$ et que l'écart à la résonance Δ présente un changement de signe correspondant à une traversée de la résonance $\Delta = 0$. Nous avons représenté les valeurs propres (1.9) au cours du temps sur la figure 1.2 avec leurs branches asymptotiques représentant les valeurs propres pour $\Omega = 0$, c'est-à-dire lorsque les deux niveaux ne sont pas couplés

$$\lambda_+^{(\Omega=0)}(\tau) = \Delta(\tau), \quad \lambda_-^{(\Omega=0)}(\tau) = 0 \quad (1.19a)$$

$$|\varphi_+^{(\Omega=0)}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |0\rangle, \quad |\varphi_-^{(\Omega=0)}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |1\rangle \quad (1.19b)$$

Nous avons considéré dans cet exemple le modèle Allen-Eberly défini par $\Omega(\tau) = \Omega_0 \operatorname{sech}(\tau)$ et $\Delta(\tau) = \Delta_0 \tanh(\tau)$. Les valeurs propres λ_+ et λ_- forment un *presque-croisement* de largeur Ω_0 à l'instant $\tau = 0$. Si on suit par continuité chacune des valeurs propres de τ allant de l'infini par valeur négative à l'infini par valeur positive, c'est à dire si *la dynamique suit chacune des branches dans un régime suffisamment adiabatique*, on observe une rotation des valeurs propres. En effet, le calcul asymptotique des vecteurs propres donne pour $|\varphi_+\rangle$

$$\tan(\theta(\tau \rightarrow -\infty)) = -\frac{\Omega(\tau \rightarrow -\infty)}{\Delta(\tau \rightarrow -\infty)} = -\frac{0}{-\Delta_0} = 0^+ \Rightarrow \theta = 0 \quad (1.20)$$

ce qui implique

$$|\varphi_+(-\infty)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv |0\rangle \quad (1.21)$$

d'autre part,

$$\tan(\theta(\tau \rightarrow +\infty)) = -\frac{\Omega(\tau \rightarrow +\infty)}{\Delta(\tau \rightarrow +\infty)} = -\frac{0}{+\Delta_0} = 0^- \Rightarrow \theta = \pi \quad (1.22)$$

ce qui implique

$$|\varphi_+(+\infty)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |1\rangle \quad (1.23)$$

de même, on obtient pour $|\varphi_-\rangle$ les connections aux limites suivantes

$$|\varphi_-(-\infty)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv |1\rangle, \quad |\varphi_-(+\infty)\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv -|0\rangle. \quad (1.24)$$

Cette remarque n'est pas triviale, elle montre en effet l'ambiguïté de l'étiquetage par continuité des valeurs propres au cours du temps. Ainsi par continuité, on passe de l'état $|0\rangle$ à $|1\rangle$ et réciproquement (à un signe près). On peut donc conclure que, à partir d'une condition initiale donnée, l'évolution suffisamment adiabatique du système induit asymptotiquement une transition.

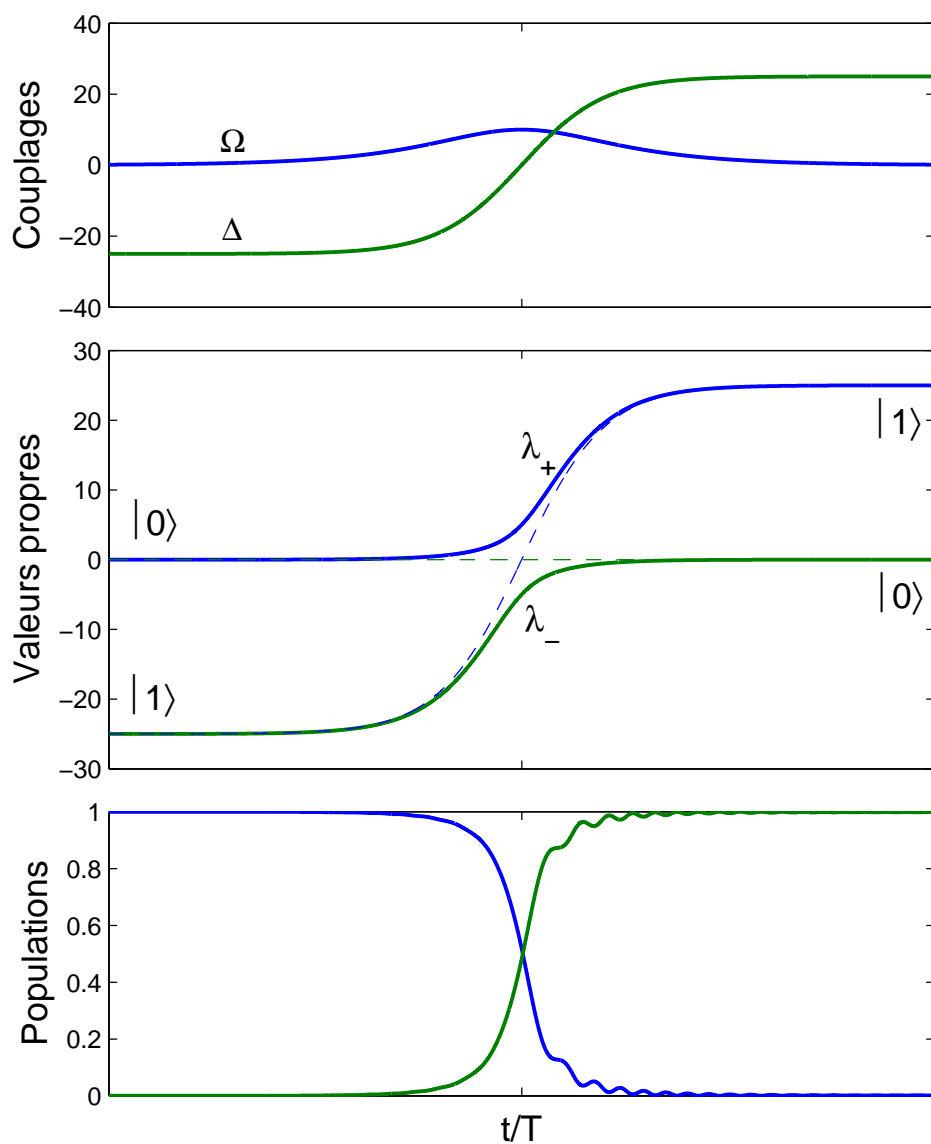


FIG. 1.2 – Dynamique du modèle Allen-Eberly dans le régime adiabatique pour $\Omega_0 T = 10$ et $\Delta_0 T = 25$

1.4 Phase géométrique de Berry

Nous avons vu dans la section 1.1 de ce chapitre, que lors d'une évolution adiabatique du système, la fonction d'onde accumule une phase δ qui est la somme de la phase dynamique (1.6) et d'une phase géométrique (1.7), nommée ainsi car elle dépend de la géométrie de la trajectoire (et pas de la vitesse) parcourue dans l'espace des paramètres variant lentement au cours du temps. Berry a précisément déterminé cette phase géométrique dans le cas où le système suit une courbe fermée (une boucle) dans l'espace des paramètres [11]. Si nous notons par \mathcal{C} cette trajectoire et par \mathbf{R} le vecteur formé par l'ensemble des paramètres variant lentement au cours du temps, la phase géométrique s'écrit alors

$$\phi_n^g(\mathcal{C}) = i \oint_{\mathcal{C}} \langle n(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R} \quad (1.25)$$

Dans le cas particulier où seulement *deux* paramètres varient lentement au cours du temps, Berry a montré que la phase (1.25), sous la condition du transport parallèle, prend la valeur π si la trajectoire dans l'espace des paramètres encercle une dégénérescence des valeurs propres du système [11] et elle est nulle si aucune de ces dégénérescences n'est entourée. Si de plus *un seul* paramètre varie lentement alors la phase géométrique est nulle. Dans le cas général où plus que deux paramètres varient, la phase géométrique peut prendre une valeur quelconque. Dans la suite, nous allons à l'aide d'un exemple explicite, calculer la phase de Berry dans le cas où la dynamique suit une boucle encerclant la dégénérescence dans l'espace des paramètres. Nous considérons en particulier l'exemple d'un système à deux niveaux où seulement deux paramètres varient lentement au cours du temps.

Considérons le système à deux niveaux décrit par la figure 1.1. L'Hamiltonien s'écrit dans l'approximation des ondes tournantes (RWA)

$$H(\tau) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\Delta(\tau) & \Omega(\tau)e^{-i\varsigma} \\ \Omega(\tau)e^{i\varsigma} & \Delta(\tau) \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

où interviennent les paramètres Ω , Δ et ς qui désignent respectivement la fréquence de Rabi, l'écart à la résonance et la phase du laser à l'origine (pour un champ de la forme $\varepsilon(\tau) = \varepsilon_0 \cos(\omega\tau - \varsigma)$). L'état du système est décrit à chaque instant par la fonction d'onde $|\psi(\tau)\rangle$, solution de l'équation de Schrödinger

$$\frac{i}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} |\psi(\tau)\rangle = H(\tau) |\psi(\tau)\rangle, \quad |\psi(\tau)\rangle = \begin{bmatrix} B_+(\tau) \\ B_-(\tau) \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2 \quad (1.27)$$

avec $|B_+(\tau)|^2 + |B_-(\tau)|^2 = 1$. Nous supposons que le système est initialement connecté à l'état fondamental $|0\rangle$ *i.e.* $B_+(\tau_i) = 1, B_-(\tau_i) = 0$. Les états adiabatiques du système $|\varphi_{\pm}(\tau)\rangle$ sont définis comme les vecteurs propres de l'Hamiltonien (1.26), associés aux valeurs propres $\lambda_{\pm}(\tau)$

$$H(\tau) |\varphi_{\pm}(\tau)\rangle = \lambda_{\pm}(\tau) |\varphi_{\pm}(\tau)\rangle. \quad (1.28)$$

avec

$$\lambda_{\pm}(\tau) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta^2(\tau) + \Omega^2(\tau)} \quad (1.29)$$

Si au cours de la dynamique, nous fixons la phase ς , l'Hamiltonien possède alors deux paramètres ($\tilde{\Omega}(\tau) \equiv \Omega(\tau)e^{-i\varsigma}$ et $\Delta(\tau)$) qui peuvent évoluer indépendamment les uns des autres au

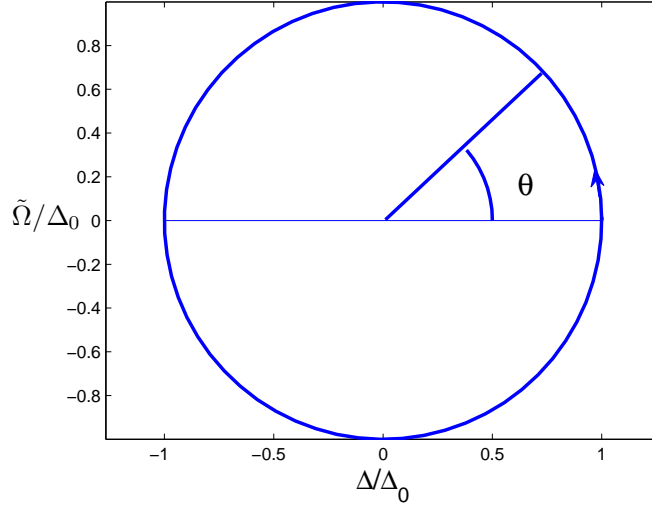


FIG. 1.3 – La trajectoire dans l'espace des paramètres comme étant une boucle qui encercle la dégénérescence localisée au point $(\Delta = 0$ et $\tilde{\Omega} = 0)$, paramétrisée par l'angle dynamique $0 \leq \theta \leq 2\pi$ et de rayon Δ_0

cours du temps. On suppose ici sans perte de généralité que $\Omega(\tau) > 0$. La figure 1.3 montre une trajectoire dans l'espace des paramètres $(\Delta, \tilde{\Omega})$ comme étant une boucle qui encercle la dégénérescence localisée au point $(\Delta = 0, \tilde{\Omega} = 0)$. Une telle trajectoire peut être obtenue avec $\tilde{\Omega}(\tau)$ décomposé en une séquence de deux impulsions, la première positive (*i.e.* $\varsigma = 0$), la seconde négative (*i.e.* $\varsigma = \pi$) et avec la paramétrisation $\Delta = \Delta_0 \cos \theta$ et $\tilde{\Omega} = \Delta_0 \sin \theta$, où θ est l'angle dynamique défini par la relation

$$\tan \theta = \tilde{\Omega}/\Delta, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi. \quad (1.30)$$

En posant maintenant $|\psi_A(\tau)\rangle = R^\dagger(\theta(\tau))|\psi(\tau)\rangle$, où $R(\theta(\tau))$ est la transformation unitaire qui a pour vecteurs colonnes les vecteurs propres $|\varphi_\pm(\tau)\rangle$:

$$R(\theta(\tau)) = \begin{pmatrix} \cos(\theta(\tau)/2) & -\sin(\theta(\tau)/2) \\ \sin(\theta(\tau)/2) & \cos(\theta(\tau)/2) \end{pmatrix}, \quad (1.31)$$

l'équation de Schrödinger (1.27) se réécrit

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} |\psi_A(\tau)\rangle = H_A(\tau) |\psi_A(\tau)\rangle \quad (1.32)$$

avec

$$H_A(\tau) = \begin{pmatrix} T\lambda_+(\tau) & i\gamma(\tau)/2 \\ -i\gamma(\tau)/2 & T\lambda_-(\tau) \end{pmatrix}, \quad (1.33)$$

le couplage non-adiabatique défini par

$$\gamma(\tau) \equiv \frac{d\theta(\tau)}{d\tau} = \frac{\dot{\tilde{\Omega}}(\tau)\Delta(\tau) - \tilde{\Omega}(\tau)\dot{\Delta}(\tau)}{\Delta^2(\tau) + \tilde{\Omega}^2(\tau)} \quad (1.34)$$

et la fonction d'onde

$$|\psi_A(\tau)\rangle = \begin{bmatrix} A_+(\tau) \\ A_-(\tau) \end{bmatrix} = R^\dagger(\theta(\tau))|\psi(\tau)\rangle = R^\dagger(\theta(\tau)) \begin{bmatrix} B_+(\tau) \\ B_-(\tau) \end{bmatrix}. \quad (1.35)$$

Dans la limite adiabatique, mathématiquement définie comme $T \rightarrow \infty$, les termes du couplage non-adiabatique peuvent être négligés devant leur écart en énergie $T|\lambda_+ - \lambda_-|$. En remarquant que initialement $|\psi_A(\tau_i)\rangle = |0\rangle$, la solution de l'équation (1.32) s'écrit

$$|\psi_A(\tau)\rangle = e^{-iT \int_{\tau_i}^{\tau} \lambda_+(s) ds} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.36)$$

Tenant compte de l'équation (1.35), on obtient

$$|\psi(\tau)\rangle = R(\theta(\tau)) e^{-iT \int_{\tau_i}^{\tau} \lambda_+(s) ds} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.37)$$

Ainsi on obtient à la fin de l'interaction et après avoir effectué une boucle complète (figure 1.3),

$$|\psi(\tau_f)\rangle = R(2\pi) e^{-iT\Delta_0(\tau_f - \tau_i)/2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = -e^{-iT\Delta_0(\tau_f - \tau_i)/2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.38)$$

La phase en facteur dans l'exponentielle peut être identifiée comme étant la phase dynamique. Notons dans cet exemple les vecteurs propres du système satisfont la condition du transport parallèle (1.18). Si nous appliquons maintenant le théorème adiabatique (en utilisant l'équation (1.4)) donnant à la fin du processus

$$|\psi(\tau_f)\rangle = e^{-iT\Delta_0(\tau_f - \tau_i)/2} e^{-i\phi^g} |\varphi_+(\theta = 0)\rangle = e^{-iT\Delta_0(\tau_f - \tau_i)/2} e^{-i\phi^g} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.39)$$

En comparant les équations (1.38) et (1.39), la phase géométrique ϕ^g peut être identifiée donc à π . Elle correspond exactement à la discontinuité de la phase associée aux vecteurs propres entre $\theta = 0$ et $\theta = 2\pi$:

$$\phi^g = -Im \{ \ln [\langle \varphi_+(\theta = 0) | \varphi_+(\theta = 2\pi) \rangle] \} = \pi. \quad (1.40)$$

Dans le cas où le nombre de paramètres est supérieur à deux, la phase géométrique peut prendre des valeurs différentes. La méthode adoptée dans cet exemple a été généralisée pour les systèmes à trois niveaux dans la référence [19].

1.5 Passage adiabatique par effet Raman stimulé (STIRAP)

L'une des applications les plus populaires basées sur le passage adiabatique est le STIRAP (Stimulated Raman Adiabatic Passage). Cette technique [20, 21, 23–25, 78] permet le transfert de population entre deux états métastables.¹ L'une des propriétés les plus importantes du STIRAP est qu'elle possède un état propre qui n'a pas de composantes sur l'état excité, appelé généralement un état sombre. Autrement dit, si nous forçons la fonction d'onde du

1. Un état métastable est un état dont la durée de vie est longue par rapport au temps d'évolution du système, ce qui permet de le considérer comme un état stable lors de la dynamique.

système à suivre cette état tout au long de la dynamique par passage adiabatique, alors le transfert de population s'effectue en s'affranchissant des pertes par émission spontanée dues à l'état excité utilisé lors du couplage. Un autre avantage de cette technique est qu'elle ne requiert pas un contrôle précis des différents paramètres mis en jeu. Ces deux caractéristiques en font une méthode *robuste* pour le transfert de population. Dans la suite, nous allons décrire la dynamique du système dans la limite adiabatique. En particulier, nous allons établir les conditions sur les pulsations de Rabi permettant une évolution adiabatique idéale.

1.5.1 Système et Hamiltonien effectif

On considère le système à trois niveaux composé de deux états métastables $|0\rangle, |1\rangle$ et d'un état excité $|e\rangle$, dont le taux de pertes par émission spontanée est noté γ (figure 1.4). Les

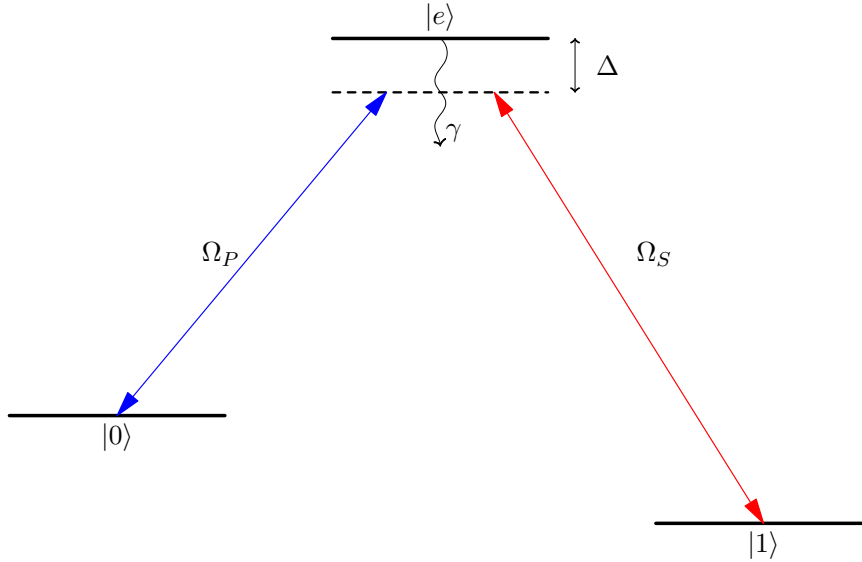


FIG. 1.4 – *Système à trois niveaux et couplages utilisés pour le STIRAP. L'état $|1\rangle$ est initialement peuplé.*

états métastables $|0\rangle, |1\rangle$ sont respectivement couplés à l'état excité $|e\rangle$ par les lasers pompe et Stokes, de champ électrique $\vec{E}_i(t) = \vec{\mathcal{E}}_i(t) \cos(\omega_i t - \phi_i)$ ($i = P, S$). L'Hamiltonien du système s'écrit alors, dans la base $\{|0\rangle, |e\rangle, |1\rangle\}$ et dans dans l'approximation des ondes tournantes [10]

$$H = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & \Omega_P e^{-i\phi_P} & 0 \\ \Omega_P e^{i\phi_P} & 2\Delta & \Omega_S e^{i\phi_S} \\ 0 & \Omega_S e^{-i\phi_S} & 0 \end{bmatrix}, \quad (1.41)$$

où interviennent les pulsations de Rabi Ω_i que l'on suppose positives sans perte de généralité, reliées aux amplitudes $\vec{\mathcal{E}}_i(t)$ et aux moments dipolaires $\vec{\mu}_i$ par la relation

$$\Omega_i(t) = -\frac{\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mathcal{E}}_i(t)}{\hbar}. \quad (1.42)$$

L'Hamiltonien (1.41) admet les valeurs propres instantanées

$$\lambda_0 = 0, \quad (1.43a)$$

$$\lambda_+ = \frac{\hbar}{2}(\Delta + \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}) = \frac{\hbar\Omega}{2} \tan \psi, \quad (1.43b)$$

$$\lambda_- = \frac{\hbar}{2}(\Delta - \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}) = -\frac{\hbar\Omega}{2} \cot \psi, \quad (1.43c)$$

associées aux vecteurs propres instantanés

$$|\varphi_0\rangle = \begin{bmatrix} \cos \theta \\ 0 \\ -e^{i\phi} \sin \theta \end{bmatrix}, \quad |\varphi_+\rangle = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \psi \\ \sin \psi e^{i\phi_P} \\ e^{i\phi} \cos \theta \cos \psi \end{bmatrix}, \quad |\varphi_-\rangle = \begin{bmatrix} \sin \theta \sin \psi \\ -\cos \psi e^{i\phi_P} \\ e^{i\phi} \cos \theta \sin \psi \end{bmatrix}, \quad (1.44)$$

où les angles dynamiques θ, ψ , la pulsation Ω et la phase relative ϕ sont définis par les relations

$$\tan \theta = \frac{\Omega_P}{\Omega_S}, \quad (1.45a)$$

$$\tan \psi = \frac{\Delta + \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}}{\Omega}, \quad (1.45b)$$

$$\Omega = \sqrt{\Omega_P^2 + \Omega_S^2}, \quad (1.45c)$$

$$\phi = \phi_P - \phi_S, \quad (1.45d)$$

et avec $\theta, \psi \in [0, \frac{\pi}{2}]$.

1.5.2 Évolution adiabatique du système

On désigne par $|\Psi(\tau)\rangle$ la fonction d'onde du système solution de l'équation de Schrödinger

$$\frac{i}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} |\Psi(\tau)\rangle = H |\Psi(\tau)\rangle. \quad (1.46)$$

En posant

$$|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = R^\dagger |\psi(\tau)\rangle, \quad (1.47)$$

où $R(\tau)$ est la transformation unitaire définie par

$$R(\tau) = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \cos \psi & \sin \theta \sin \psi \\ 0 & \sin \psi e^{i\phi_P} & -\cos \psi e^{i\phi_P} \\ -e^{i\phi} \sin \theta & e^{i\phi} \cos \theta \cos \psi & e^{i\phi} \cos \theta \sin \psi \end{bmatrix}, \quad (1.48)$$

l'équation (1.46) se réécrit

$$\frac{i}{T} \frac{\partial}{\partial \tau} |\tilde{\Psi}(\tau)\rangle = \left[D(\tau) - \frac{i}{T} R^\dagger(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau) \right] |\tilde{\Psi}(\tau)\rangle \quad (1.49a)$$

$$= \begin{bmatrix} \lambda_0 & -\frac{i}{T} \dot{\theta} \cos \psi & -\frac{i}{T} \dot{\theta} \sin \psi \\ \frac{i}{T} \dot{\theta} \cos \psi & \lambda_+ & -\frac{i}{T} \dot{\psi} \\ \frac{i}{T} \dot{\theta} \sin \psi & \frac{i}{T} \dot{\psi} & \lambda_- \end{bmatrix} |\tilde{\Psi}(\tau)\rangle. \quad (1.49b)$$

Dans la limite adiabatique caractérisée par $T \rightarrow +\infty$, les termes de couplages non-adiabatiques peuvent être négligés devant leurs écarts en énergie. Ceci mène aux conditions d'adiabaticité

$$\left| \frac{2}{T} \dot{\theta} \cos \psi \right| \ll |\lambda_0 - \lambda_+|, \quad (1.50a)$$

$$\left| \frac{2}{T} \dot{\theta} \sin \psi \right| \ll |\lambda_0 - \lambda_-|, \quad (1.50b)$$

$$\left| \frac{2}{T} \dot{\psi} \right| \ll |\lambda_+ - \lambda_-|, \quad (1.50c)$$

soit,

$$|\dot{\theta}| \ll \left| \Omega T \frac{\sin \psi}{4 \cos^2 \psi} \right|, \quad (1.51a)$$

$$|\dot{\theta}| \ll \left| \Omega T \frac{\sin \psi}{4 \cos^2 \psi} \right|, \quad (1.51b)$$

$$|\dot{\psi}| \ll \left| \frac{T}{2} \sqrt{\Delta^2 + \Omega^2} \right|. \quad (1.51c)$$

Dès lors que les conditions (1.51) sont vérifiées, l'équation de Schrödinger (1.49) se résout facilement et la fonction d'onde prend la forme simple

$$|\tilde{\Psi}(\tau)\rangle = \exp\left(-iT \int_{-\infty}^{\tau} D(s) ds\right) |\tilde{\Psi}(\tau_i)\rangle(\tau) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right). \quad (1.52)$$

Notons que dans cet exemple, la définition (1.44) des vecteurs propres instantanés assure la condition du transport parallèle :

$$\langle \varphi_j(\tau) | \frac{\partial}{\partial \tau} | \varphi_j(\tau) \rangle = 0, \quad j = \{0, +, -\} \quad (1.53)$$

pour laquelle la phase géométrique est nulle. Dans la suite, on considère la situation lorsque la fonction d'onde est initialement connectée à l'état $|0\rangle$, *i.e.* $|\Psi(\tau_i)\rangle = |0\rangle$. En particulier, on peut voir que le vecteur $|\varphi_0\rangle$ permet le transfert de population de l'état $|0\rangle$ vers l'état $|1\rangle$ lorsque l'angle θ varie de 0 à $\pi/2$. Ce vecteur n'a pas de composante sur l'état excité et n'est donc pas affecté par l'émission spontanée, d'où son appellation *vecteur sombre*. Sa valeur propre associée étant nulle à tout instant, aucune phase dynamique n'est accumulée lors de son suivi adiabatique. Plus précisément, la définition (1.45a) de l'angle θ implique que le transfert de population s'effectue suivant l'état sombre par une séquence dite *contre-intuitive* des impulsions laser, *i.e.* le laser Stokes est enclenché avant la pompe. Cette séquence conduit aux connections suivantes des états initial $|\Psi(\tau_i)\rangle$ et final $|\Psi(\tau_f)\rangle$

$$|\Psi(\tau_i)\rangle = |0\rangle = |\varphi_0(\tau_i)\rangle \quad (1.54a)$$

↓

$$|\Psi(\tau)\rangle = |\varphi_0(\tau)\rangle \quad (1.54b)$$

↓

$$|\Psi(\tau_f)\rangle = |\varphi_0(\tau_f)\rangle = -e^{i\phi} |1\rangle. \quad (1.54c)$$

Le transfert de population de l'état $|0\rangle$ vers l'état $|1\rangle$ s'accompagne donc d'un gain de phase $\phi + \pi$. On peut remarquer que la phase relative ϕ peut être en général contrôlée très précisément expérimentalement.

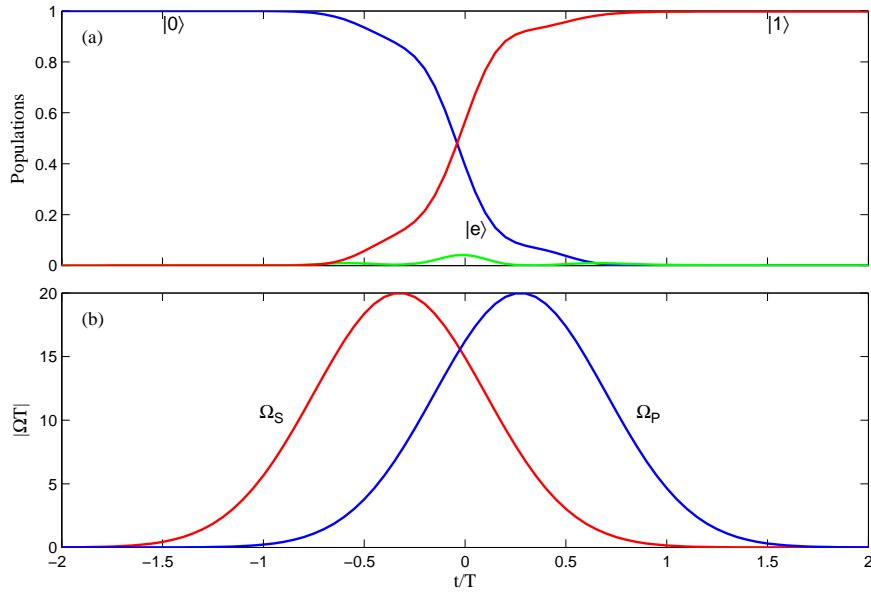


FIG. 1.5 – Évolution des populations (a) lors du processus STIRAP. Les pulsations de Rabi (b) sont de forme gaussienne de largeur à mi-hauteur T . Le délai entre les impulsions Stokes et pompe est $0.6T$ et leur amplitude maximale est $\Omega_0 T = 20$.

Nous avons présenté sur la figure 1.5, l'évolution adiabatique du système pour des pulsations de Rabi de forme gaussienne de largeur à mi-hauteur T et d'amplitude $\Omega_0 T = 20$. Le délai entre les impulsions pompe et Stokes est $0.6T$ [Figure 1.5(b)]. Le transfert adiabatique de population est visible sur la figure 1.5(a). Il commence dès que l'impulsion pompe est enclenchée, et s'achève lorsque l'impulsion Stokes s'éteint.

1.5.3 Robustesse

La propriété la plus importante du processus STIRAP, à l'instar des processus adiabatiques, est la robustesse vis-à-vis de l'aire des impulsions choisie suffisamment grande. On s'attend ainsi à un transfert de population final relativement insensible aux fluctuations des amplitudes du champ laser. En effet, seule compte la variation globale de l'angle θ de 0 à $\pi/2$, et la forme précise des impulsions utilisées est donc inessentielle (Cependant elle doit présenter une forme lisse). La figure 1.6 montre aussi la robustesse du transfert vis-à-vis du délai τ entre les impulsions Stokes et pompe, en fonction de l'écart à la résonance Δ . Plus la région est claire, plus le transfert de population est proche de l'unité. On peut voir en particulier que l'influence du délai est assez peu sensible dans une gamme τ allant de $0.5T$ à $0.8T$ sur le transfert de population. La figure 1.6(b) montre aussi la robustesse vis-à-vis des pertes par émission spontanée dues à l'état excité, étant donné que la dynamique évolue suivant l'état sombre. On peut en effet montrer que l'état sombre $|\varphi_0\rangle$ reste de la même forme (1.44) lorsque l'on prend en compte une perte de l'état excité $|e\rangle$. Les probabilités de transition ont été obtenues dans ce cas en ajoutant à l'écart Δ un terme imaginaire $-i\gamma$ tel que $\gamma T = 1$, ce qui correspond à des pertes significatives de l'état excité $|e\rangle$. Lorsque la dynamique n'est pas parfaitement adiabatique, les pertes par émission spontanée dues à l'état excité sont négligeables dans la limite où le taux de perte γ est faible, *i.e.*

$$\Omega_0^2 T \gg \gamma. \quad (1.55)$$

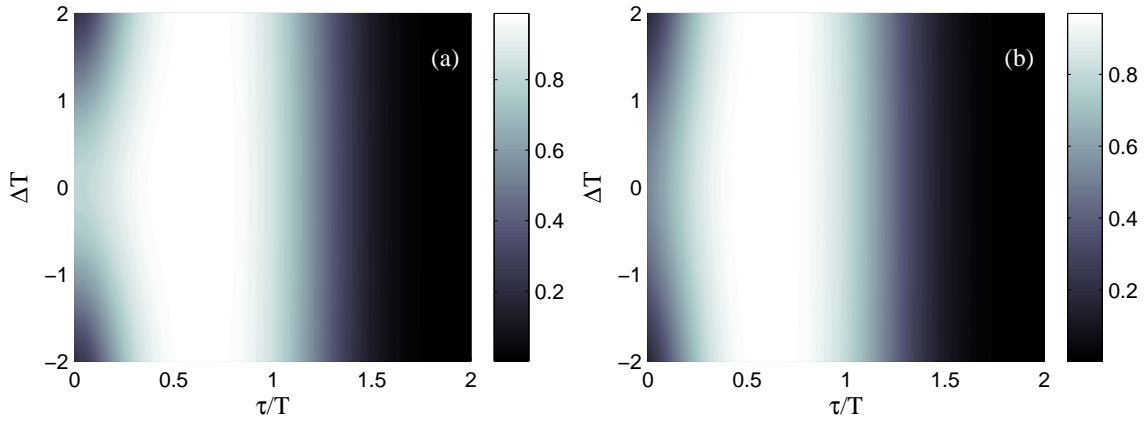


FIG. 1.6 – Probabilité de transition de l'état $|0\rangle$ vers l'état $|1\rangle$ en fonction de l'écart à la résonance Δ et du délai entre les impulsions τ , pour un système non-dissipatif (a), et pour un état excité à pertes $\gamma = 1/T$ (b). Les pulsations de Rabi des lasers sont d'amplitude maximale $\Omega_0 T = 20$.

1.6 Optimisation du passage adiabatique

Nous avons vu dans les sections précédentes que la clé du passage adiabatique pour réaliser des transferts de population contrôlés, repose sur le fait que la dynamique suit un seul état propre instantané continûment connecté aux états initial et final. De plus cette technique est robuste vis-à-vis de certains paramètres du laser. La réalisation expérimentale est de ce point de vue favorable puisque les paramètres du laser fluctuent en général. En particulier, le transfert de population par passage adiabatique est pratiquement insensible à l'aire de l'impulsion, si celle-ci est suffisamment grande pour satisfaire le suivi adiabatique.

Cependant, dans les expériences réelles, les impulsions laser ont des aires finies. Il est donc utile d'analyser les conditions qui permettent d'optimiser le passage adiabatique. Autrement dit, *les conditions qui minimisent les pertes non-adiabatiques commises au cours de la dynamique*. Les transitions non-adiabatiques sont données par la formule de Dykhne-Davis-Pechukas (DDP) [5,6,41]. Cette formule stipule que dans la limite adiabatique (*i.e.* $T \rightarrow \infty$), la probabilité de transition non-adiabatique à la fin du processus est de l'ordre de e^{-TC} où C est une constante positive. Toutefois, l'analyse des surfaces d'énergie dans l'espace des paramètres permet d'optimiser le passage adiabatique. En effet, si nous traçons la différence de ces surfaces, les figures obtenues exhibent des lignes de niveau [7,26,27], c'est à dire des trajectoires pour lesquelles la différence entre les valeurs propres du système est constante. Le but de cette section est de montrer que, dans un modèle à deux niveaux, *ces lignes de niveau sont les trajectoires optimales qui minimisent les pertes non-adiabatiques données par la formule DDP et qui conduisent à des transferts de population robustes et complets*.

Dans la suite, nous introduirons tous les outils nécessaires comme la formule de Dykhne-Davis-Pechukas, les points de transitions dans le plan complexe et les lignes de Stokes. Puis nous démontrerons que les lignes de niveau sont les trajectoires optimales pour le passage adiabatique.

1.6.1 Formule de Dykhne-Davis-Pechukas (DDP)

Considérons un système à deux niveaux décrit par l'Hamiltonien hermitique réel

$$H(\tau) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega(\tau) \\ \Omega(\tau) & 2\Delta(\tau) \end{pmatrix}, \quad \tau = \frac{t}{T}. \quad (1.56)$$

Les valeurs propres du système s'écrivent

$$\lambda_{\pm}(\tau) = \frac{1}{2}\Delta(\tau) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2(\tau) + \Omega^2(\tau)} \quad (1.57)$$

elles sont associées aux vecteurs propres normalisés

$$|\varphi_{+}\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}, \quad |\varphi_{-}\rangle = \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{bmatrix} \quad (1.58)$$

où θ est l'angle dynamique défini par

$$\tan(\theta) = -\frac{\Omega}{\Delta}, \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (1.59)$$

Dans la suite, nous supposons que l'interaction du champ laser avec l'atome commence au temps $\tau_i \rightarrow -\infty$ et finit au temps $\tau_f \rightarrow +\infty$, ce qui correspond à

$$\Omega(\tau_i \rightarrow -\infty) = \Omega(\tau_f \rightarrow +\infty) = 0. \quad (1.60)$$

Pour assurer que le système traverse la résonance, nous supposons de plus que

$$\Delta(\tau_i) < 0, \quad \Delta(\tau_f) > 0. \quad (1.61)$$

Dans la suite, nous supposons que la fonction d'onde du système est initialement connectée à l'état $|\varphi_{+}\rangle$

$$|\psi(\tau_i)\rangle = |\varphi_{+}(\tau_i)\rangle = |0\rangle. \quad (1.62)$$

Dans la limite adiabatique, la fonction d'onde suit alors continûment l'état $|\varphi_{+}\rangle$. Nous nous intéressons en particulier à la probabilité de transition non-adiabatique finale

$$P(T) = |\langle \varphi_{-}(\tau_f) | \psi(\tau_f) \rangle|^2 \quad (1.63)$$

qui correspond à la probabilité de transition entre les états adiabatiques à la fin de l'interaction. La formule DDP estime cette probabilité:

$$P(T) = |e^{iT D(\tau_c)}|^2 = e^{-2T \Im\{D(\tau_c)\}}, \quad (1.64)$$

avec

$$D(\tau_c) = \int_0^{\tau_c} [\lambda_{+}(s) - \lambda_{-}(s)] ds \quad (1.65)$$

est l'intégrale de la différence des valeurs propres étendue par continuation analytique dans le plan complexe. τ_c , appelé *point de transition* est un point complexe vérifiant

$$\lambda_{+}(\tau_c) - \lambda_{-}(\tau_c) = 0 \quad (1.66)$$

et qui est localisé dans le demi-plan complexe supérieur. S'il existe N points de transition dans le plan complexe possédant une contribution significative, alors la formule (1.64) devient [38, 39]

$$P(T) = \left| \sum_{n=1}^N e^{iT D(\tau_c^{(n)})} \right|^2. \quad (1.67)$$

Cette formule est valable sous les conditions suivantes [38, 39]:

1. L'Hamiltonien H possède un prolongement analytique $H(z)$ dans le domaine $S_d = \{z = \tau + is \in \mathbb{C}, \quad |s| \leq d\}$ de largeur $2d$ entourant l'axe réel.
2. $H(\tau)$ tend rapidement vers deux valeurs H^+ et H^- pour $\tau \rightarrow \pm\infty$ tel que

$$\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} \sup_{|s| < d} |H(\tau + is) - H^\pm| \tau^{\alpha+1}, \quad \alpha > 0$$

3. Les valeurs propres ne sont pas dégénérées sur l'axe réel.

Notons que pour un Hamiltonien hermitique complexe, cette formule doit-être complétée en ajoutant des préfacteurs de nature géométrique [5, 38].

1.6.2 Points de Transition et lignes de Stokes

Pour calculer la probabilité de transition non-adiabatique, nous avons besoin des points complexes particuliers pour lesquels le prolongement analytique de la différence des valeurs propres est nul. Dans ce genre du problème, les lignes de Stokes jouent un rôle capital. En effet ces lignes selectionnent les points de transition qui auront une contribution dominante dans la formule DDP. Ces lignes sont définies par

$$\left\{ z = \tau + is, \quad \Im \left[\int_0^z (\lambda_+(s) - \lambda_-(s)) ds \right] = \Im \left[\int_0^{\tau_c} (\lambda_+(s) - \lambda_-(s)) ds \right] \right\}. \quad (1.68)$$

Il faut noter que contrairement à ce qui est parfois énoncé, les points de transition dominants ne sont pas nécessairement les plus proches de l'axe réel. En effet, les points de transition qui auront la plus grande contribution dans la formule DDP seront ceux pour lesquels la ligne de Stokes associée sera la plus proche de l'axe réel [38, 39]. Si de plus N points de transition sont reliés par la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel, nous devons prendre en compte la contibution de ces N points [38]. Une étude plus détaillée sur les lignes de Stokes est présentée dans l'appendice de ce chapitre.

1.6.3 Lignes de niveau dans l'espace des paramètres

Une ligne de niveau est une courbe de l'espace des paramètres pour laquelle la distance entre les valeurs propres est constante

$$\lambda_+(\tau) - \lambda_-(\tau) = \sqrt{\Delta^2(\tau) + \Omega^2(\tau)} = C \quad (1.69)$$

où C est une constante. Si on se fixe initialement $\Delta(\tau_i) = -\Delta_0$, *i.e.* $\Delta_0 > 0$ et $\Omega(\tau_i) = 0$, l'équation des lignes de niveau s'écrit

$$\frac{\Omega^2}{\Delta_0^2} + \frac{\Delta^2}{\Delta_0^2} = 1. \quad (1.70)$$

Ces trajectoires sont donc des demi-cercles dans l'espace des paramètres de rayon Δ_0 et de centre $(\Delta = 0, \Omega = 0)$. Dans la suite du chapitre, nous nous intéressons à plusieurs formes d'impulsions notées $\Lambda(\tau)$. Pour cela, nous écrivons le couplage comme

$$\Omega(\tau) = \Omega_0 \Lambda(\tau) \quad (1.71)$$

où $\Lambda(\tau)$ est une fonction continue vérifiant $0 \leq \Lambda(\tau) \leq 1$ et maximale au point $\tau = 0$. L'écart à la résonance peut s'écrire sous la forme

$$\Delta(\tau) = \Delta_0 f(\tau) \quad (1.72)$$

avec

$$f(\tau) = \frac{|\tau|}{\tau} \sqrt{1 - \Lambda^2(\tau)}. \quad (1.73)$$

Cette paramétrisation implique pour la différence des valeurs propres

$$\lambda_+(\tau) - \lambda_-(\tau) = \sqrt{\Delta_0^2 + (\Omega_0^2 - \Delta_0^2) \Lambda^2(\tau)}. \quad (1.74)$$

Une ligne de niveau correspond alors à $\Omega_0 = \Delta_0$. Dans la suite du chapitre, nous voulons comparer le transfert de population correspondant à ces lignes de niveau dans l'espace des paramètres à celui d'autres trajectoires. Nous choisissons en particulier des ellipses. Les équations correspondantes sont

$$\left(\frac{\Omega}{\Omega_{\pm}}\right)^2 + \left(\frac{\Delta}{\Delta_0}\right)^2 = 1 \quad (1.75)$$

qui sont des ellipses de petit axe de longueur $2\Delta_0$ et de grand axe de longueur $2\Omega_{\pm}$ centrées au point $(\Omega = 0, \Delta = 0)$.

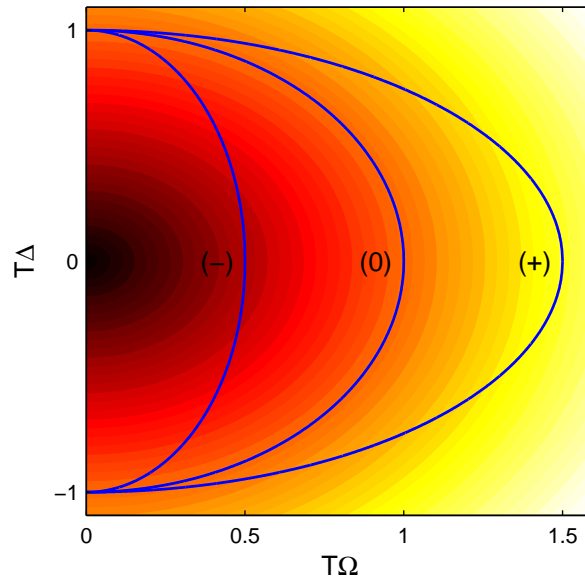


FIG. 1.7 – Lignes de niveau de la différence entre les valeurs propres en fonction des paramètres ΔT et ΩT . Plus la couleur est sombre, plus la différence entre les valeurs propres est petite. Nous avons représenté trois trajectoires différentes pour lesquels $T\Delta_0 = 1$: (0) est une ligne de niveau, (-) et (+) sont respectivement des chemins en dessous et au dessus de la ligne de niveau (0).

1.7 Conséquences de la formule de Dykne-Davis-Pechukas

Optimiser le passage adiabatique revient à trouver les trajectoires optimales dans l'espace des paramètres qui minimisent les transitions non-adiabatiques données par la formule DDP dans la limite adiabatique. Ainsi, une simple analyse de cette formule montre que la contribution non-adiabatique est nulle si l'une de deux conditions suivantes est vérifiée

- toutes les exponentielles de l'équation (1.67) tendent vers zero. *i.e.* $\Im \left[D(\tau_c^{(n)}) \right] \rightarrow \infty$, pour tout n .
- La somme des exponentielles induit des interférences destructives.

Nous nous intéressons en particulier à la première condition. On considère pour cela le type d'enveloppes qui satisfont la condition

$$\Lambda(\tau) \rightarrow \infty \quad \text{si et seulement si} \quad \Im[\tau] \rightarrow 0. \quad (1.76)$$

Cette classe de fonctions comprend en particulier les gaussiennes. En effet

$$\Lambda(\tau) = e^{-\tau^2} = e^{-(\Re[\tau])^2} e^{(\Im[\tau])^2} e^{-2i\Re[\tau]\Im[\tau]}. \quad (1.77)$$

En tenant compte des équations (1.66) et (1.74), la fonction Λ vérifie

$$\Lambda(\tau_c) = \pm i \frac{\Delta_0}{\sqrt{-\Delta_0^2 + \Omega_0^2}}, \quad \text{si} \quad \Omega_0 > \Delta_0 \quad (1.78a)$$

$$\Lambda(\tau_c) = \pm \frac{\Delta_0}{\sqrt{\Delta_0^2 - \Omega_0^2}}, \quad \text{si} \quad \Omega_0 < \Delta_0 \quad (1.78b)$$

Ainsi, la classe d'enveloppes considérée vérifie aussi

$$|\Omega_0 - \Delta_0| \rightarrow 0 \quad \text{si et seulement si} \quad \Im\tau_c \rightarrow \infty. \quad (1.79)$$

Nous déduisons alors

$$\lim_{|\Omega_0 - \Delta_0| \rightarrow 0} \Im [D(\tau_c)] = \Im \left[\int_0^\infty \Delta_0 ds \right] = \infty \quad (1.80)$$

ce qui permet d'écrire

$$\lim_{|\Omega_0 - \Delta_0| \rightarrow 0} P(T) = 0. \quad (1.81)$$

Ainsi, *les corrections non-adiabatiques tendent vers zéro pour la ligne de niveau*. Cette proposition est en particulier satisfaite pour les enveloppes gaussiennes. L'analyse des termes de la formule de Dykne-Davis-Pechukas mène donc à la conclusion que pour toute ligne de niveau, les transitions non-adiabatiques tendent vers zéro. Cependant, numériquement, nous remarquons des différences entre les lignes de niveaux. En effet, les lignes de niveaux qui correspondent à de petites valeurs de $T\Delta_0$ conduisent à des taux de transitions plus grands que celles avec de grandes valeurs de $T\Delta_0$. Ceci s'explique par le fait que si $T\Delta_0 = T\Omega_0$ est petit alors la dynamique du système est loin d'être dans le régime adiabatique et la formule DDP n'est donc plus valable. Dans la suite, nous allons mettre en évidence l'optimisation avec des impulsions $\Lambda(\tau) = e^{-\tau^2}$. Les points de transition sont donnés par [7]

$$\tau_{c\pm}^{(n)} = \pm \sqrt{\frac{\alpha_n - \beta}{2}} + i \sqrt{\frac{\alpha_n + \beta}{2}}, \quad \text{pour} \quad \Omega_0 < \Delta_0 \quad (1.82)$$

avec n un entier positif ou nul et

$$\alpha_n = \sqrt{\beta^2 + n^2\pi^2}, \quad \beta = \log \frac{\Delta_0}{\sqrt{\Delta_0^2 - \Omega_0^2}} \quad (1.83)$$

et

$$\tau_{c\pm}^{(n)} = \pm \sqrt{\frac{\gamma_n + \delta}{2}} + i\sqrt{\frac{\gamma_n - \delta}{2}}, \quad \text{pour } \Omega_0 > \Delta_0 \quad (1.84)$$

avec n un entier positif ou nul et

$$\gamma_n = \sqrt{\delta^2 + (2n - \frac{1}{2})^2\pi^2}, \quad \delta = \lg \frac{\sqrt{\Omega_0^2 - \Delta_0^2}}{\Delta_0}. \quad (1.85)$$

Les points de transition et les lignes de Stokes sont présentés dans la figure 1.8. Nous remarquons que dans le cas où $\Omega_0 < \Delta_0$, la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel passe par un seul point de transition $\tau_{c,+}^{(0)} = i\sqrt{\beta}$. On conclut alors que la probabilité de transition non-adiabatique est donnée dans ce cas par

$$P(T) = e^{-2T\Im(D(\tau_c^{(0)}))}. \quad (1.86)$$

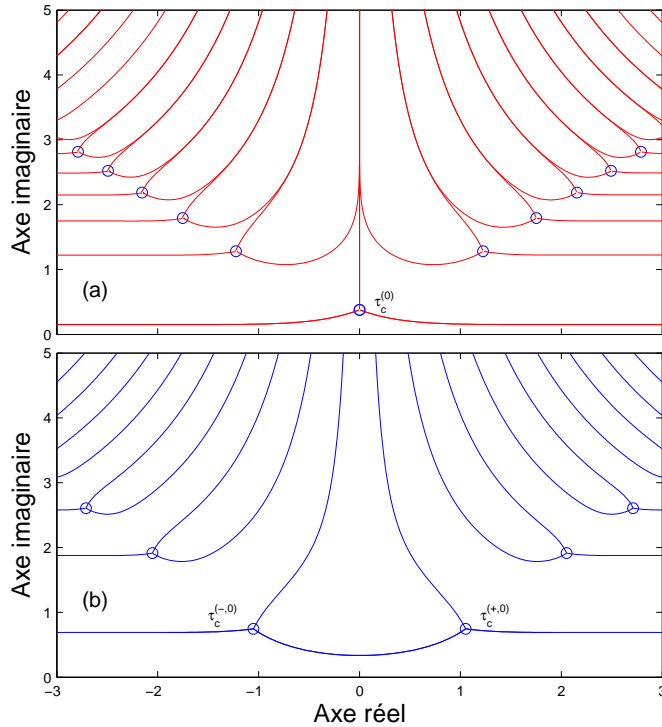


FIG. 1.8 – Lignes de Stokes dans le plan complexe pour des impulsions gaussiennes: (a) pour $\Omega_0/\Delta_0 = \frac{1}{2} < 1$ et (b) pour $\Omega_0/\Delta_0 = 2 > 1$. Les points de transitions sont repérés par des cercles.

Maintenant si nous considérons le cas où $\Omega_0 > \Delta_0$, la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel traverse deux points de transition $\tau_{\pm}^{(0)} = \pm\sqrt{\gamma_0 + \delta} + i\sqrt{\gamma_0 - \delta}$. Notons que dans ce dernier cas il peut y avoir des interférences entre les deux points de transition. En utilisant maintenant le fait que $\Im(D(\tau_{c,+}^{(0)})) = \Im(D(\tau_{c,-}^{(0)}))$, la probabilité de transition non-adiabatique devient

$$P(T) = e^{-2T\Im(D(\tau_{c,+}^{(0)}))} |e^{iT\Re(D(\tau_{c,+}^{(0)}))} + e^{iT\Re(D(\tau_{c,-}^{(0)}))}|^2 \quad (1.87)$$

Ainsi, la probabilité de transition oscille pour $\Omega_0 > \Delta_0$. Nous avons représenté dans la figure 1.9 le calcul numérique de $\log(P(T))$ en fonction des paramètres $\Omega_0 T$ et $\Delta_0 T$. Plus la probabilité de transition est petite plus la couleur est sombre. Pour $\Delta_0 = 0$, nous observons des oscillations de la probabilité de transition qui s'identifient aux oscillations de Rabi. En effet, le transfert de population est complet lorsque l'aire de l'impulsion vérifie

$$\Omega_0 T \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(\tau) d\tau = (2n + 1)\pi, \quad (1.88)$$

où n est un entier positive. Cependant, ce type de transfert de population n'est pas robuste par rapport aux fluctuations des paramètres du champ laser vu que l'aire de l'impulsion doit être égale à une valeur précise pour que le transfert soit complet. La figure 1.9 montre aussi des lignes sombres caractérisant un transfert de population complet qui partent des maximas des oscillations de Rabi. Autour de ces lignes, on observe une zone de transfert de population quasi-complète de plus en plus large pour $\Delta_0 T$ croissant jusqu'à la ligne qui correspond aux lignes de niveau. Le long de ces lignes, on observe donc un transfert de population de plus en plus robuste vis-à-vis de l'aire de l'impulsion pour $\Delta_0 T$ croissant. Nous remarquons de plus que ces lignes convergent vers les lignes de niveaux pour Ω_0 et Δ_0 croissant qui tendent vers la zone la plus sombre de la figure qui correspond à la zone où le transfert de population dans le régime adiabatique est de plus en plus robuste.

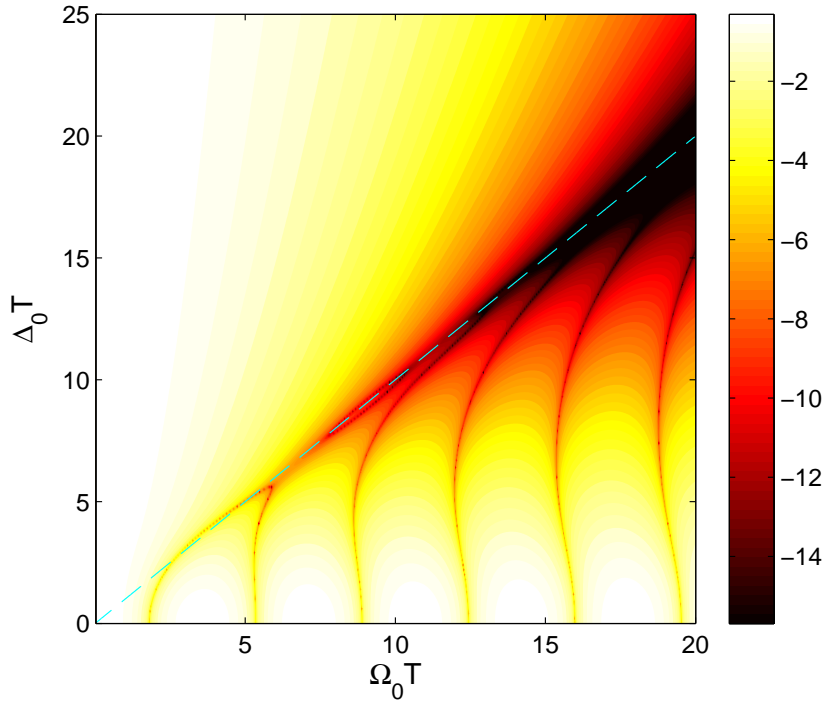


FIG. 1.9 – Logarithme de la probabilité de transition non-adiabatique à la fin de l'interaction en fonction des paramètres $\Omega_0 T$ et $\Delta_0 T$. Plus la probabilité P est petite, plus la couleur est foncée. La ligne en bleu correspond aux lignes de niveau $\Omega_0 = \Delta_0$.

D'une manière générale, l'aire de l'impulsion minimale qui engendre un transfert de population est obtenue pour $\Delta_0 = 0$ et $n = 0$ dans l'équation (1.88). Ce qui correspond à $\Omega_0 T \int_{-\infty}^{+\infty} \Lambda(\tau) d\tau = \pi$. Toutefois, la figure (1.9) montre que pour un Δ_0 donné, les lignes de niveau correspondent à la plus petite aire de l'impulsion pour laquelle la correction non-adiabatique tend vers zéro dans la limite adiabatique. Autrement dit, les lignes de niveau peuvent être interprétées comme une limite pour l'aire de l'impulsion permettant un transfert de population complet et robuste.

1.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons analysé les avantages de la technique adiabatique. En particulier, une évolution suffisamment lente produit asymptotiquement une transition à la fin de l'interaction. Contrairement aux méthodes de type impulsion- π permettant un transfert de population complet et nécessitant un contrôle très précis de l'aire de l'impulsion laser, le passage adiabatique est une technique très robuste dans le sens où le transfert de population sera relativement insensible aux fluctuations des paramètres du champ laser comme l'aire de l'impulsion par exemple. Cependant, le passage adiabatique consiste à faire évoluer le système de façon relativement lente et requiert donc une aire d'impulsion a priori large.

Toutefois, il est possible d'optimiser le passage adiabatique si la dynamique suit des trajectoires particulières dans l'espace des paramètres. Nous venons en effet de démontrer dans ce chapitre qu'une ligne de niveau, définie de sorte que la différence des valeurs propres soit constante à chaque instant, permet de minimiser à zéro les transitions non-adiabatiques données par la formule DDP. Des études plus détaillées sur le passage adiabatique *parallèle* ont été

réalisées dans les références [7,8] et qui ont confirmé l'efficacité de cette technique en terme de robustesse et transfert de population final. Dans le chapitre suivant, nous allons généraliser ce concept à des systèmes à trois niveaux afin de réaliser un transfert de population complet et robuste vis-à-vis aux fluctuations des paramètres du champ laser.

– RÉSUMÉ DU CHAPITRE 1 –

OBJECTIF : Ce chapitre introduit le *passage adiabatique* et décrit les *conditions qui minimisent les pertes non-adiabatiques* commises au cours de la dynamique.

DÉFINITIONS :

- ① Le *passage adiabatique* correspond à une évolution lente du système, effectuée en suivant les états propres instantanés du système.
- ② L'évolution suffisamment adiabatique du système induit asymptotiquement une transition à la fin de l'interaction lorsque l'écart à la résonance présente un changement de signe au cours de la dynamique.
- ③ Le passage adiabatique est *robuste* vis-à-vis aux fluctuations du champ laser.
- ④ Le passage adiabatique requiert à priori une aire d'impulsion large pour conserver sa robustesse.
- ⑤ Les corrections non-adiabatiques à la fin du processus sont déterminées par la formule de Dykhne-Davis-Pechukas.
- ⑥ Optimiser le passage adiabatique revient à trouver les *trajectoires optimales* dans l'espace des paramètres qui *minimisent* les transitions non-adiabatiques.
- ⑦ Une ligne de niveau est une courbe de l'espace des paramètres pour laquelle la distance entre les valeurs propres est constante à chaque instant.

RÉSULTATS CONNUS :

- ① Une ligne de niveau permet de minimiser à zéros les transitions non-adiabatiques données par la formule DDP.
- ② La technique du passage adiabatique parallèle est robuste vis-à-vis de fluctuations du champ laser.
- ③ Pour une largeur de chirp donnée, la ligne de niveau correspond à la plus *petite* aire de l'impulsion pour laquelle les corrections non-adiabatiques tendent vers zéro.

Annexe A

Étude des lignes de Stokes

Les lignes de Stokes nous permettent de sélectionner les points de transition qui ont une contribution dominante dans la formule DDP. Ces lignes sont définies par

$$\left\{ z = \tau + is \in \mathbb{C}, \quad \Im \left[\int_0^z \sqrt{\rho(s)} ds \right] = \Im \left[\int_0^{\tau_c^{(n)}} \sqrt{\rho(s)} ds \right] \right\}, \quad (\text{A.1})$$

où la fonction $\sqrt{\rho(\tau)}$ est définie par

$$\sqrt{\rho(\tau)} = \lambda_+(\tau) - \lambda_-(\tau) \quad (\text{A.2})$$

et les points complexes $\tau_c^{(n)}$, $n = 1 \dots N$, représentent les points de transition vérifiant

$$\rho(\tau_c^{(n)}) = 0, \quad n = 1 \dots N. \quad (\text{A.3})$$

Commençons tout d'abord par étudier le comportement des lignes de Stokes autour du point de transition $\tau_c^{(n)}$. Nous considérons pour cela le développement de Taylor de ρ comme

$$\rho(z) = \frac{d\rho}{dz}(\tau_c^{(n)})(z - \tau_c^{(n)}) + \mathcal{O}(z - \tau_c^{(n)})^2. \quad (\text{A.4})$$

En définissant les nombres réels r_0 et α tel que

$$\frac{d\rho}{dz}(\tau_c^{(n)}) = r_0 e^{i\alpha} \quad (\text{A.5})$$

et en tenant compte de la définition (A.1), les lignes de Stokes vérifient au voisinage du point de transition

$$\Im \left\{ e^{i\alpha}(z - \tau_c^{(n)}) \right\} = 0. \quad (\text{A.6})$$

Si nous écrivons maintenant la quantité $z - \tau_c^{(n)}$ sous la forme

$$z - \tau_c^{(n)} = r e^{i\theta}, \quad (\text{A.7})$$

où r et θ sont des nombres réels, on déduit alors à partir de l'équation (A.6)

$$\theta = \frac{2}{3}k\pi - \frac{\alpha}{3}. \quad (\text{A.8})$$

L'équation (A.8) montre donc qu'il existe trois directions différentes pour les lignes de Stokes qui partent du point de transition. Elles sont séparées les unes des autres par un angle de $\frac{2\pi}{3}$.

Un algorithme proposé par A. Joye permet de construire ces lignes comme suit. Nous considérons pour cela un seul point de transition τ_c . Toutes les formules que nous trouverons seront valables pour chaque point de transition. Dans la suite, nous considérons la paramétrisation

$$z = \gamma(\tau), \quad (\text{A.9})$$

vérifiant $\gamma(\tau_0) = \tau_c$. L'équation (A1) se réécrit donc

$$\Im \left[\int_{\tau_0}^{\tau} \sqrt{\rho(\gamma(s))} \dot{\gamma}(s) ds \right] = 0, \quad (\text{A.10})$$

d'où la condition

$$\Im \left[\sqrt{\rho(\gamma(\tau))} \dot{\gamma}(\tau) \right] = 0. \quad (\text{A.11})$$

En écrivant maintenant $\gamma(\tau)$ sous la forme $\gamma(\tau) = \gamma_r(\tau) + i\gamma_i(\tau)$, nous obtenons la condition

$$\dot{\gamma}_r(\tau) \Im \left[\sqrt{\rho(\gamma(\tau))} \right] + \dot{\gamma}_i(\tau) \Re \left[\sqrt{\rho(\gamma(\tau))} \right] = 0, \quad (\text{A.12})$$

soit le système d'équation

$$\dot{\gamma}_r(\tau) = \sigma \Re \left[\sqrt{\rho(\gamma(\tau))} \right], \quad (\text{A.13a})$$

$$\dot{\gamma}_i(\tau) = -\sigma \Im \left[\sqrt{\rho(\gamma(\tau))} \right], \quad (\text{A.13b})$$

où $\sigma = \pm 1$. Si nous voulons suivre une ligne de Stokes dans la direction donnée par l'angle θ , nous devons donc utiliser un des deux choix $\sigma = \pm 1$ dans les équations (A.13), celui pour lequel la direction est instable pour ne pas rester sur le point de transition. Pour l'algorithme, nous résolvons les équation (A.13) pour une condition initiale située au voisinage du point de transition dans les trois directions données par l'équation (A.8).

Chapitre 2

STIRAP ultra-rapide par des impulsions lasers mises en forme

UN TRANSFERT complet ou partiel de population entre les états d'un système par des impulsions lasers est au coeur de plusieurs processus quantiques [1] allant de la chimie [2] jusqu'à l'information quantique, tels que l'implémentation de portes quantiques [3] qui se formule par le contrôle des transitions effectuées dans le système par les champs laser.

Plusieurs techniques qui permettent un transfert complet de population. Certaines méthodes de type impulsion- π requièrent un contrôle très précis de l'aire de l'impulsion et ne sont pas donc robuste vis-à-vis des fluctuations des paramètres du champ laser [47, 48]. Le passage adiabatique qui permet à la dynamique de suivre continûment un seul état propre du système, est souvent utilisé pour mettre en oeuvre ces transferts en raison de sa robustesse par rapport aux fluctuations du champ laser et à la connaissance imparfaite du système étudié. En particulier la technique STIRAP [20–25] qui permet de réaliser un transfert complet de population dans un système à trois niveaux en Λ et l'application la plus populaire du passage adiabatique. Le principal avantage de ce processus repose sur le fait que le transfert de population s'effectue suivant l'état sombre qui n'a pas de composantes sur l'état excité, ce qui permet à la dynamique de s'affranchir des pertes. Toutefois, cette technique exige en pratique une aire d'impulsion à priori assez large afin de satisfaire l'adiabaticité et empêche dans la plupart des cas son utilisation pour des impulsions laser plus courtes que nanosecondes.

Cependant, nous avons montré dans le chapitre précédent, que pour un système à deux niveaux contrôlé par une forme appropriée d'un champ laser, que l'aire minimale de l'impulsion laser dans le régime adiabatique permettant un transfert complet de population est typiquement égale à 1.5π [7] qui n'est pas beaucoup plus grande que la valeur π . Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, cette constatation est le résultat d'un concept topologique montrant les surfaces d'énergies en fonction des paramètres du laser [43]. Ainsi, les chemins qui permettent d'optimiser les pertes non-adiabatiques sont des lignes de niveau dans l'espace des paramètres et qui correspondent à des valeurs propres instantanées qui sont parallèles à chaque instant.

Dans un système en forme Λ (où nous supposons que les deux états fondamentaux ne sont pas couplés pour des raisons de symétrie), le moyen le plus simple permettant un transfert de population complet entre les deux états fondamentaux est d'exciter le système par deux impulsions- π successives, une pour chaque transition, conduisant à une aire d'impulsion totale de 2π . Il a été montré cependant, que l'aire minimale pour un tel processus est de $\sqrt{3}\pi$ qui

correspond à une géodésique singulière Riemannienne [28].

Nous allons montrer dans ce chapitre qu'on peut étendre la procédure d'optimisation à un système à trois niveaux en Λ . La stratégie consiste alors à faire suivre la dynamique des valeurs propres parallèles à chaque instant, contrôlées par deux champs lasers de formes appropriées. On obtient un transfert complet de population pour une aire totale d'impulsion aussi petite que 3π tout en conservant la robustesse du processus adiabatique. Cela nous offre la possibilité de mettre en oeuvre un passage adiabatique ultra-rapide par effet Raman stimulé en utilisant des impulsions lasers ultra-courtes (picoseconde et subpicosecondes) (voir par exemple les Réf [53–59]).

2.1 Passage adiabatique parallèle dans un système en Λ

2.1.1 Système et Hamiltonien effectif

On considère le système à trois niveaux en Λ composé de deux états de base $|1\rangle$ et $|3\rangle$ et d'un état excité $|2\rangle$ (Figure 2.1).

Les états $|1\rangle$, $|3\rangle$ sont respectivement couplés à l'état $|2\rangle$ par les lasers pompe et Stokes, de champ électrique $\vec{E}_i(t) = \vec{\epsilon}_i(t) \cos(\omega_i t)$, ($i=p,s$). L'Hamiltonien du système s'écrit dans la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, dans l'approximation des ondes tournantes et dans un système d'unités où $\hbar = 1$

$$H = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0 & \Omega_p & 0 \\ \Omega_p & 2\Delta & \Omega_s \\ 0 & \Omega_s & 2\delta \end{bmatrix}. \quad (2.1)$$

Les paramètres qui peuvent à priori varier au cours du temps sont les pulsations de Rabi $\Omega_i \geq 0$ (choisies réelles pour simplifier), reliées aux amplitudes $\vec{\epsilon}_i$ et aux moments dipolaires $\vec{\mu}_i$ par la relation

$$\Omega_i(t) = -\vec{\epsilon}_i(t) \vec{\mu}_i(t) \quad (2.2)$$

et les écarts à la résonance à un et deux photons notés respectivement Δ (par rapport au laser pompe) et δ définis par les relations

$$\Delta = \omega_2 - \omega_1 - \omega_p \quad (2.3a)$$

$$\delta = \omega_3 - \omega_1 - \omega_p + \omega_s \quad (2.3b)$$

où $\hbar\omega_j$, $j = 1,2,3$, correspondent aux énergies des états $|j\rangle$.

2.1.2 Construction des valeurs propres instantanées parallèles

Dans cette section, nous appliquons l'analyse décrite dans le chapitre précédent aux systèmes à trois niveaux: nous avons besoin que le système évolue de telle sorte que les valeurs propres demeurent parallèles à chaque instant afin d'optimiser le passage adiabatique. Nous remarquons ainsi que cette technique impose des mises en formes spécifiques pour les champs lasers Pompe et Stokes. Toutefois, l'usage des impulsions avec un glissement de fréquence linéaire a été proposé dans la Réf [33] et étudié dans [34] dans le but de minimiser la population de l'état intermédiaire. Dans la suite, nous allons déterminer les conditions nécessaires

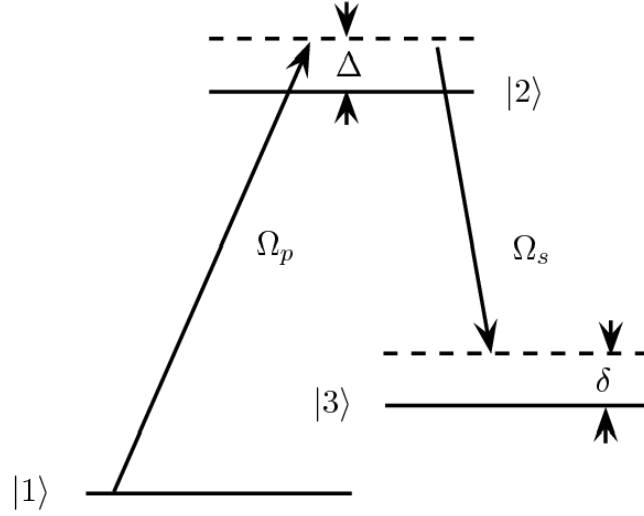


FIG. 2.1 – Schéma d'un système à trois niveaux en configuration Λ . L'état métastable $|1\rangle$ est initialement peuplé.

et suffisantes permettant le parallélisme des valeurs propres. Puis, nous proposerons une implémentation numérique du problème qui peut être exploitée expérimentalement par l'usage de la technologie récente permettant la mise en forme des impulsions lasers dans un régime subpicoseconde en passant dans le domaine spectral.

Les valeurs propres de l'Hamiltonien (2.1) ont été calculées et étudiées dans la Ref [35]. Elle s'écrivent sous la forme

$$\omega_0 = \frac{1}{3}(\Delta + \delta + \tilde{\Omega} \cos(\frac{\zeta}{3})) \quad (2.4a)$$

$$\omega_+ = \frac{1}{3}(\Delta + \delta + \tilde{\Omega} \cos(\frac{2\pi - \zeta}{3})) \quad (2.4b)$$

$$\omega_- = \frac{1}{3}(\Delta + \delta + \tilde{\Omega} \cos(\frac{2\pi + \zeta}{3})) \quad (2.4c)$$

où les paramètres $\tilde{\Omega}$ et ζ sont définis par

$$\tilde{\Omega} = [3(\Omega_p^2 + \Omega_s^2) + 4(\Delta^2 - \Delta\delta + \delta^2)]^{\frac{1}{2}} \quad (2.5a)$$

$$\zeta = 2\pi - \arccos \frac{[9(\Omega_p^2 + \Omega_s^2) - 4(2\Delta - \delta)(2\delta - \Delta)](\Delta + \delta) - 27\Omega_p^2\delta}{\tilde{\Omega}^3}. \quad (2.5b)$$

Notons que les valeurs propres (2.4) ont été choisies de telle sorte que l'angle ζ soit $\pi < \zeta < 2\pi$. Ce qui implique

$$|\cos(\frac{\zeta}{3})| \leq \frac{1}{2}, \quad (2.6a)$$

$$\frac{1}{2} \leq |\cos(\frac{2\pi - \zeta}{3})| \leq 1, \quad (2.6b)$$

$$-1 \leq |\cos(\frac{2\pi + \zeta}{3})| \leq -\frac{1}{2}. \quad (2.6c)$$

Les équations (2.4) montrent alors que les valeurs propres satisfont à chaque instant

$$\omega_- \leq \omega_0 \leq \omega_+. \quad (2.7)$$

Dans la suite, nous avons besoin du parallélisme des valeurs propres. Plus précisément, si nous désignons par $|\varphi_{-,0,+}\rangle$ les vecteurs propres correspondants, nous imposons pour des raisons de symétrie que

$$\omega_+ - \omega_0 = \omega_0 - \omega_- = C, \quad (2.8)$$

où C est une constante, et que le vecteur propre $|\varphi_0\rangle$ transporte adiabatiquement la population de l'état $|1\rangle$ (supposé initialement peuplé) à l'état cible $|3\rangle$ à la fin de l'interaction. Afin que la condition (2.8) soit satisfaite à chaque instant, les paramètres $\tilde{\Omega}$ et ζ doivent vérifier

$$\tilde{\Omega} = \sqrt{3}\Omega_0 = \text{Const} \quad (2.9a)$$

$$\zeta = \frac{3\pi}{2} \quad (2.9b)$$

où Ω_0 est une constante définie par

$$\Omega_0 = \sqrt{\Omega_p^2 + \Omega_s^2 + \frac{4}{3}(\Delta^2 - \Delta\delta + \delta^2)} \quad (2.10)$$

et la condition

$$[9(\Omega_p^2 + \Omega_s^2) - 4(2\Delta - \delta)(2\delta - \Delta)] \frac{(\Delta + \delta)}{27} - \Omega_p^2 \delta = 0. \quad (2.11)$$

Les valeurs propres s'écrivent donc sous la forme

$$\omega_0 = \frac{1}{3}(\Delta + \delta), \quad \omega_{\pm} = \frac{1}{3}(\Delta + \delta) \pm \frac{1}{2}\Omega_0. \quad (2.12)$$

Initialement quand le couplage est nul ($\Omega_p(-\infty) = \Omega_s(-\infty) = 0$), l'état fondamental $|1\rangle$ possède une énergie nulle. Afin d'assurer que le vecteur propre $|\varphi_0\rangle$ transporte adiabatiquement la population de l'état $|1\rangle$ à l'état $|3\rangle$, nous imposons la condition initiale

$$\delta(-\infty) = -\Delta(-\infty) = \frac{\Omega_0}{2}, \quad (2.13)$$

ce qui correspond à $\omega_0(-\infty) = 0$, $\omega_+(-\infty) = \frac{\Omega_0}{2} = \delta(-\infty)$ et $\omega_-(-\infty) = -\frac{\Omega_0}{2} = \Delta(-\infty)$. Pour que l'état $|\varphi_0\rangle$ se connecte à l'instant $t_f = +\infty$ à l'état $|3\rangle$, nous imposons la condition

$$\Delta(+\infty) = 2\delta(+\infty) \quad (2.14)$$

ce qui correspond aux connections finales suivantes:

$$\omega_0(+\infty) = \delta(+\infty) \quad (2.15a)$$

$$\omega_+(+\infty) = \delta(+\infty) + \frac{\Omega_0}{2} \quad (2.15b)$$

$$\omega_-(+\infty) = \delta(+\infty) - \frac{\Omega_0}{2}. \quad (2.15c)$$

Les équations (2.15b) et (2.15c) montrent que les connections finales des valeurs propres ω_{\pm} peuvent être choisies de deux façons différentes : soit $\omega_+(+\infty) = \Delta(+\infty)$ et $\omega_-(+\infty) = 0$, ce qui correspond à $\Delta(+\infty) = -2\Delta(-\infty) = \Omega_0$ et $\delta(+\infty) = \delta(-\infty) = \frac{\Omega_0}{2}$; soit $\omega_+(+\infty) = 0$ et $\omega_-(+\infty) = \Delta(+\infty)$, ce qui correspond à $\Delta(+\infty) = -\Omega_0$ et $\delta(+\infty) = -\frac{\Omega_0}{2}$. Les figures 2.2 et 2.3 résument les différents types de connections décrites précédemment. Dans la suite, nous allons choisir la première possibilité qui consiste à prendre $\delta(+\infty) = \frac{\Omega_0}{2}$ et $\Delta(+\infty) = \Omega_0$ (Figure 2.2).

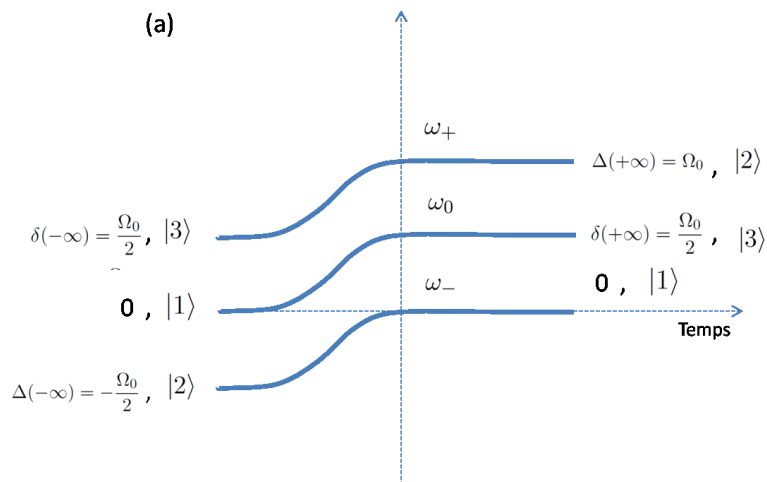


FIG. 2.2 – La dynamique du système correspondant à des énergies parallèles à chaque instant. La première possibilité consiste à choisir les valeurs des paramètres $\Delta(t)$ et $\delta(t)$ de telle sorte que la valeur propre ω_0 connecte initialement et finalement l'état fondamental $|1\rangle$ à l'état cible $|3\rangle$, la valeurs propres ω_+ connecte l'état $|3\rangle$ à l'état $|2\rangle$ et la valeur propres ω_- connecte l'état $|2\rangle$ à l'état $|1\rangle$.

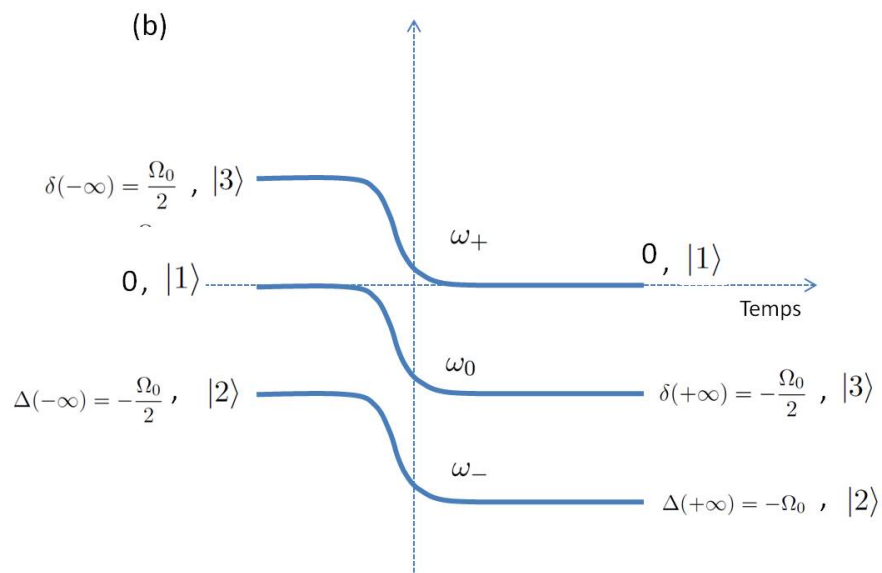


FIG. 2.3 – Comme en figure 2.2 mais pour la valeur propre ω_+ connectée initialement et finalement respectivement à l'état $|3\rangle$ et à l'état $|1\rangle$ et la valeur propre ω_- connectée initialement et finalement à l'état $|2\rangle$.

2.1.3 Implémentation numérique

Afin de trouver une simple implémentation numérique du problème, nous écrivons les paramètres $\Delta(t)$ et $\delta(t)$ comme des fonctions analytiques, symétriques autour du point $t = 0$

$$\Delta(t) = \frac{3\Omega_0}{4} \operatorname{erf}\left(\frac{t}{T}\right) + \frac{\Omega_0}{4}, \quad \delta(t) = \frac{\Omega_0}{2} \left[1 + \alpha e^{-(\beta t/T)^2}\right], \quad (2.16)$$

où α et β sont deux paramètres à choisir. La quantité T caractérise la durée du processus. Notons que le choix $\alpha = 0$ conduit à un écart à la résonance à deux photons δ constant à chaque instant *i.e.* $\delta(t) = \frac{\Omega_0}{2}$. Nous allons montrer dans la suite que ce dernier choix mène déjà à un très bon résultat. Pour α et β donnés, le choix de la constante Ω_0 constitue une solution unique du problème qui permet de définir les fréquences de Rabi $\Omega_p(t)$ et $\Omega_s(t)$ à partir des équations (2.10) et (2.11). Notons que la paramétrisation (2.16) est en quelque sorte arbitraire dans le sens où d'autres formes pour les écarts à la résonance peuvent être utilisées et conduisent a priori à des résultats très similaires (mais pas strictement identiques).

Dans la suite, nous définissons l'aire totale des impulsions lasers par

$$A = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \sqrt{\Omega_p^2(t) + \Omega_s^2(t)}. \quad (2.17)$$

Il est connu que cette grandeur caractéristique prend au moins la valeur π si on considère une transition à deux niveaux (par exemple la transition $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ contrôlée par le laser Pompe) [28]. Une autre grandeur intéressante est la fluence totale correspondant à l'intégrale de l'intensité totale du champ

$$F = \int_{-\infty}^{+\infty} dt [\Omega_p^2(t) + \Omega_s^2(t)]. \quad (2.18)$$

La figure 2.4 montre la dynamique du système qui en résulte correspondant à des énergies parallèles à chaque instant avec le choix $\Omega_0 = 5.8/T$ et $\alpha = 0$. Nous avons obtenu dans ces conditions une aire totale d'impulsion $A \approx 3.6\pi$ et une fluence totale $F \approx 40/T$. La population finale de l'état cible $|3\rangle$ obtenue dans ce cas est de l'ordre de $P_3(+\infty) \approx 0.995$ ce qui correspond à un transfert de population très efficace par passage adiabatique pour une aire d'impulsion assez modeste: environ deux fois l'aire minimale requis pour un tel processus *i.e.* $\sqrt{3}\pi$. Nous pouvons remarquer la séquence contre-intuitive des impulsions laser, *i.e.* le laser Stokes est enclenché avant la Pompe. Ceci est une conséquence du choix (2.16). Nous notons également une population non négligeable de l'état intermédiaire $|2\rangle$. Ceci est du par le fait que la dynamique n'est pas régie par un état sombre. On pourrait cependant s'attendre à ce que le processus soit rapide, généralement d'ordre subpicoseconde, ce qui nous permettra de négliger les pertes dues à l'état intermédiaire.

2.2 Comparaison avec le stirap conventionnel

Dans cette section, nous allons comparer la technique du passage adiabatique parallèle avec le processus stirap conventionnel en terme d'efficacité de transfert de population par rapport à l'aire totale d'impulsion laser A (Figure 2.5) et la fluence F (figure 2.6). Nous considérons en particulier les deux situations où l'écart à la résonance à deux photons donné par l'équation (2.16) est constant ($\alpha = 0$) et non constant ($\alpha \neq 0$). Pour le processus stirap

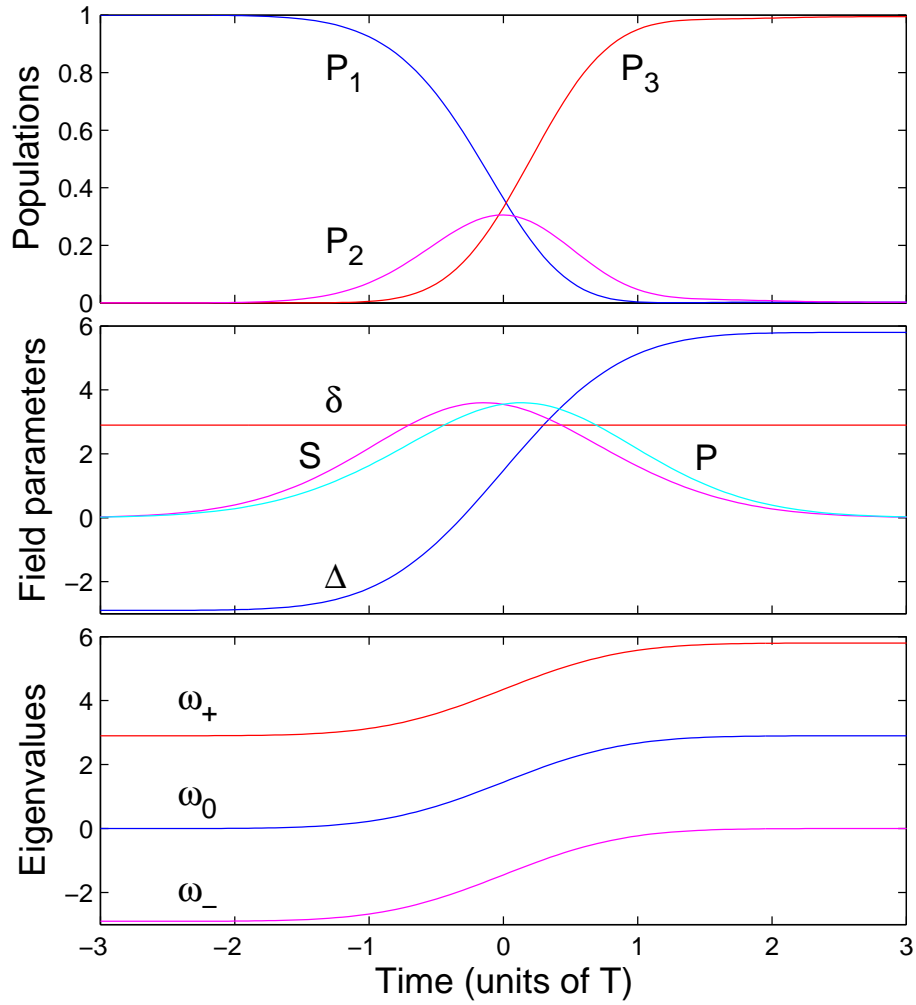


FIG. 2.4 – Dynamique du système avec le choix $\Omega_0 = 5.8/T$ (correspondant à une aire totale d'impulsion laser $A \approx 3.6\pi$). Haut: les populations $P_j(t)$ des états $|j\rangle$, $j = 1,2,3$ en fonction du temps. Milieu: Les paramètres du champ laser (en unité de $1/T$) $\Delta(t)$, $\delta(t)$ donnés par l'équation (2.16) (pour $\alpha = 0$) et les fréquences de Rabi Pomp et Stokes déterminées à partir des équations (2.10) et (2.11). Bas: les valeurs propres du système (en unité de $1/T$).

classique, nous considérons des pulsations de Rabi de formes gaussiennes de même amplitude avec une séquence contre-intuitive d'impulsions lasers

$$\Omega_p(t) = \Omega_{max} e^{-[(t-\tau/2)/T]^2}, \quad \Omega_s(t) = \Omega_{max} e^{-[(t+\tau/2)/T]^2} \quad (2.19)$$

Dans les figure (2.5) et (2.6), deux valeurs de délai τ ont été considérées. On peut d'abord remarquer une forte dépendance du transfert de population sur ce délai pour des aires d'impulsions relativement petites et donc une perte de la robustesse. Nous avons également étudié l'influence du délai entre les deux impulsions pour le stirap parallèle et nous avons obtenu une dépendance beaucoup moins importante.

Pour un écart à la résonance à deux photons constant ($\alpha = 0$), le transfert de population vers l'état cible $|3\rangle$ par la technique du passage adiabatique parallèle est déjà très efficace pour $A \approx 3.6$ (correspondant à la dynamique décrite par la figure 2.3). Notons que cette valeur de A correspond à une efficacité faible pour le stirap conventionnel. Nous récupérons cette efficacité pour une aire d'impulsion totale environ trois fois plus grande que pour le processus stirap parallèle, correspondant à une fluence d'un ordre de grandeur plus grand (voir figure 2.6). Ceci montre la supériorité de la stratégie parallèle par rapport au processus stirap classique. Nous avons représenté dans les figures 2.5 et 2.6 l'écart par rapport au transfert complet de population (à l'échelle logarithmique). Nous avons ainsi obtenu un transfert avec une précision de plus de quatre chiffres significatifs pour seulement une aire d'impulsion totale supérieure ou égale à 5.5π . Notons que cette précision pour le transfert n'est pas possible pour le stirap conventionnel pour une telle aire [26]. Toutefois, nous avons constaté qu'il est possible d'améliorer la technique du passage adiabatique parallèle si nous considérons un écart à la résonance à deux photons qui n'est pas constant au cours du temps ($\alpha \neq 0$). Le calcul numérique montre alors que le transfert de population est généralement plus efficace lorsque les paramètres α et β sont choisis de telle sorte que les deux impulsions se recouvrent presque. L'efficacité du transfert de population est présentée dans ce cas sur la figure 2.5 pour $\alpha = 0.1\Omega_0$ et $\beta = 1.25$. Nous obtenons déjà une très bonne efficacité pour une aire d'impulsion totale de $A \approx 3\pi$. Ce qui correspond à un gain sur la fluence de plus d'un ordre de grandeur par rapport au stirap conventionnel (voir figure 2.6).

2.3 Robustesse du passage adiabatique parallèle

Le principal avantage du passage adiabatique est sa robustesse *i.e.* le transfert de population final est insensible aux fluctuations des paramètres du champ laser et à la connaissance imparfaite du système étudié. Toutefois, la robustesse de la stratégie du passage adiabatique parallèle est à priori discutable car elle est principalement basée sur la formule de Davis-Dykhne-Pechukas et elle suppose entre autres que l'on puisse suivre des trajectoires spécifiques dans l'espace des paramètres [7]. Dans cette section nous allons tester numériquement la robustesse de ce processus en adoptant une simulation de type Monte Carlo développée dans la Réf. [70].

Les paramètres qui peuvent à priori fluctuer sont les amplitudes et les phases des champs lasers. Dans la suite, nous considérons un bruit de largeur $\Gamma = 0.5T$ pour les écarts à la

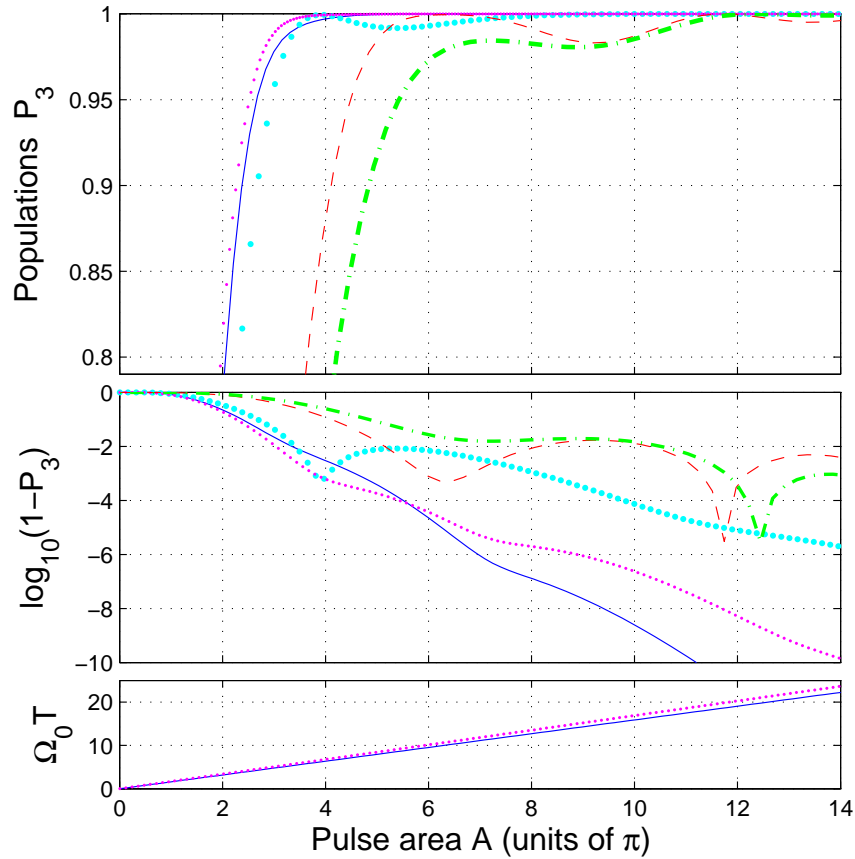


FIG. 2.5 – *Comparaison du stirap parallèle avec le processus du stirap conventionnel en terme d'efficacité du transfert de population par rapport à l'aire totale d'impulsion A . Haut: La population finale de l'état cible $|3\rangle$ obtenue par stirap parallèle avec $\alpha = 0$ (en trait plein bleu foncé), linéarisation de l'écart à la résonance $\Delta(t)$ (gros pointillés, bleus clairs), stirap conventionnel avec un délai entre les impulsions $\tau = 1.1T$ (tirets rouge) et avec un délai $\tau = T$ (tirets-pointillés verts), et stirap parallèle avec $\alpha = 0.1/T$ et $\beta = 1.25$ (pointillés fins, magenta). Milieu: L'écart par rapport au transfert complet de population (à échelle logarithmique). Bas: Les valeurs de $\Omega_0 T$ correspondantes en fonction de l'aire totale d'impulsion A .*

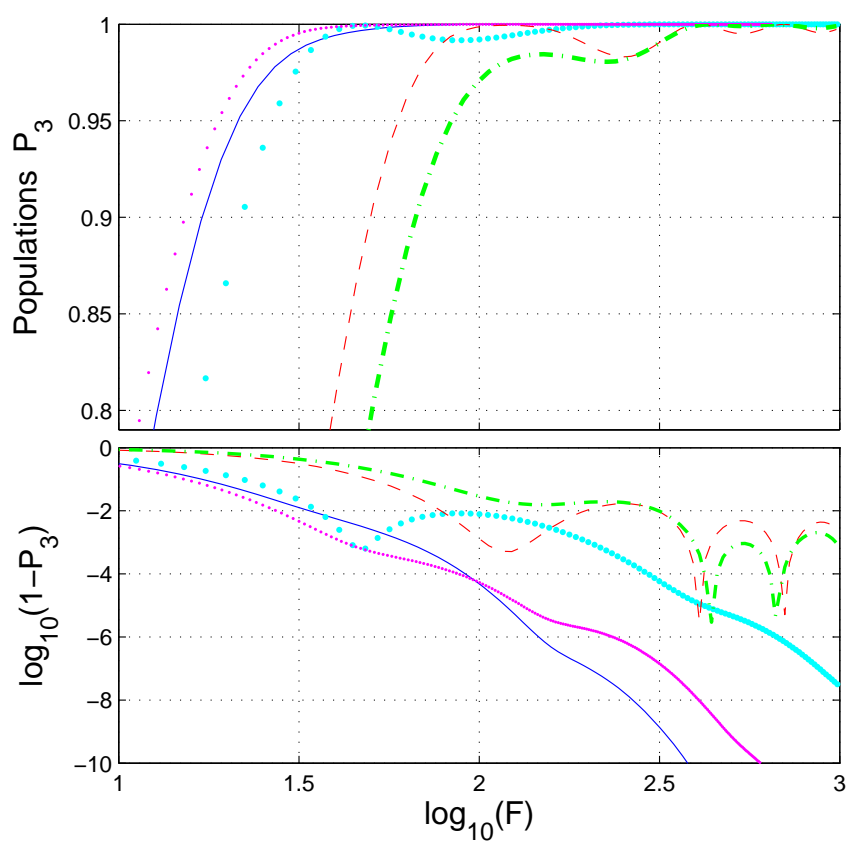


FIG. 2.6 – *Comparison du stirap parallèle avec le processus du stirap conventionnel en terme d'efficacité de transfert de population par rapport à la fluence F (en unité de $1/T$ et à l'échelle logarithmique). Les paramètres utilisés pour la comparaison sont les mêmes que dans la figure 2.5.*

résonance $\Delta_F(t)$ et $\delta_F(t)$ et pour les fréquences de Rabi $\Omega_{F,j}(t)$, $j = p, s$ défini comme

$$\Omega_{F,j}(t) = \Omega_j(t) + \Gamma\Lambda_j(t)(r_1 + r_2), \quad (2.20a)$$

$$\Delta_F(t) = \Delta(t) + \Gamma r_3 \quad (2.20b)$$

$$\delta_F(t) = \delta(t) + \Gamma r_4 \quad (2.20c)$$

où $\Omega_j(t)$, $0 \leq \Lambda_j(t) \leq 1$, $\Delta(t)$ et $\delta(t)$ représentent respectivement les fréquences de Rabi, l'enveloppe du champ laser j et les écarts à la résonance sans fluctuation. Les paramètres r_k , $k = 1, \dots, 4$, sont des nombres aléatoires vérifiant

$$-0.5 \leq r_k \leq 0.5. \quad (2.21)$$

Le nombre aléatoire r_1 est appelé une seule fois pour chaque réalisation complète de la dynamique. Ceci nous permet de varier aléatoirement l'aire totale des impulsions lasers. Par contre, les nombres r_k , $k \geq 2$, sont appelés à chaque pas d'intégration (considéré ici comme $T/300$) pour toutes les réalisations. Ceci permet de modéliser des fluctuations instantanées pour les écarts à la résonance et les fréquences de Rabi. La figure 2.7 montre les populations en présence de la fluctuation pour $\Omega_0 = 5.4/T$, $\alpha = 0.1$ et $\beta = 1.25$. Notons que dans cette figure, les paramètres du champ laser ainsi que les valeurs propres du système sont calculés pour une simple réalisation complète de la dynamique. En moyennant maintenant sur plusieurs réalisations (simulation Monte Carlo), nous avons trouvé que la population finale moyenne de l'état cible est de l'ordre $P_3(+\infty) \approx 0.993$. Ce qui correspond à une valeur assez proche comparée à celle obtenue en absence de la fluctuation (*i.e.* $P_3(+\infty) \approx 0.996$). Ceci prouve la robustesse de la technique du passage adiabatique parallèle vis-à-vis des fluctuations des paramètres du champ laser.

2.4 Implémentation du stirap parallèle par des impulsions ultra-courtes mises en forme

La mise en oeuvre du stirap parallèle requiert la conception des impulsions et des fréquences dans un régime subpicoseconde en utilisant les technologies récentes permettant un façonnage dans l'espace des fréquences. Prenons l'exemple d'une enveloppe d'une impulsion laser centrée à 800 nm d'une durée de 30 fs, le champ électrique oscille une dizaine de fois à une période de 2.7 fs. Compte tenu de ce temps si court, on ne peut donc pas faire de mesure directe de leur durée et on ne peut pas non plus modifier leur forme directement en temps réel. Cependant, l'analyse de Fourier implique que plus l'impulsion est courte, plus son spectre est large. Par exemple, une impulsion d'une durée de 100 fs centrée à 800 nm a un spectre de 10 nm de large. Si on est capable d'agir sur les composantes spectrales de façon individuelle, on peut alors modifier l'impulsion dans le domaine temporel et obtenir la forme désirée. La figure 2.8 montre une technique de façonnage très répandue : il s'agit de construire un plan de l'espace dans lequel toutes les composantes spectrales de l'impulsion sont spatialement séparées et focalisées, autrement dit, un plan de Fourier pour l'impulsion temporelle. En plaçant un masque en phase et/ou en amplitude dans ce plan, on peut alors moduler la phase et l'amplitude de chaque composante spectrale. Pour cela, on utilise un réseau à l'entrée du dispositif pour disperser les composantes de l'impulsion, un dispositif à cristaux liquides programmables qui permet de créer le masque complexe en introduisant des déphasages et/ou atténuations et un second réseau pour rassembler les composantes en un

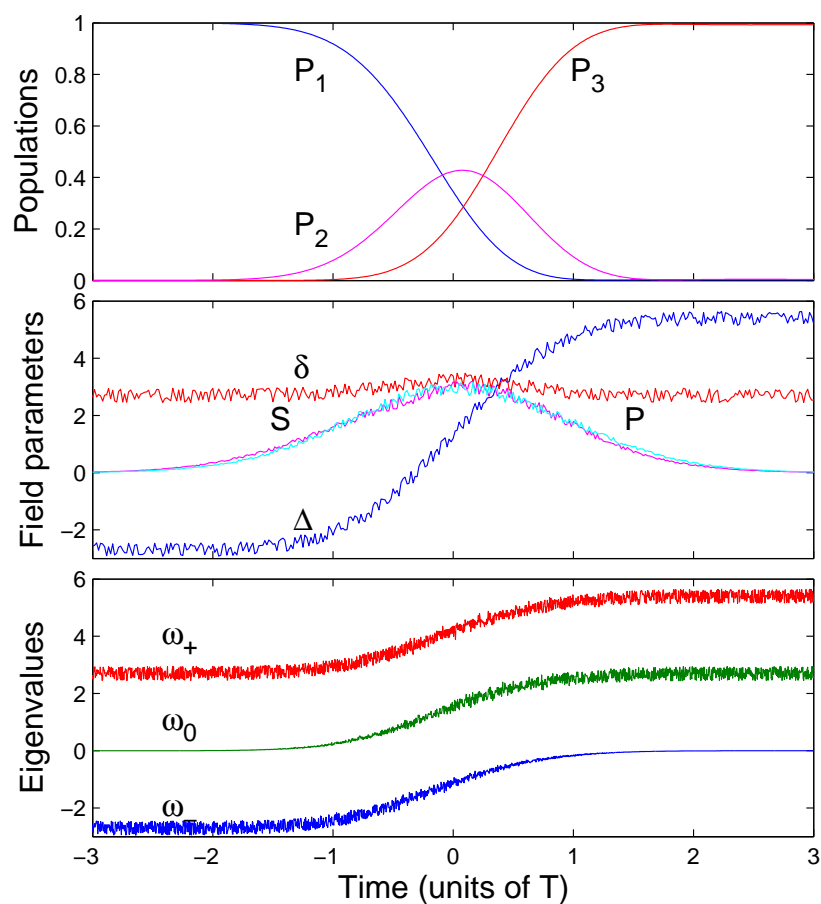


FIG. 2.7 – Robustesse du stirap parallèle vis-à-vis des fluctuations des paramètres du champ laser avec $\Omega_0 = 5.4/T$, $\alpha = 0.1$ et $\beta = 1.25$. Les paramètres du champ ainsi que les valeurs propres du système sont calculés pour une simple réalisation complète de la dynamique.

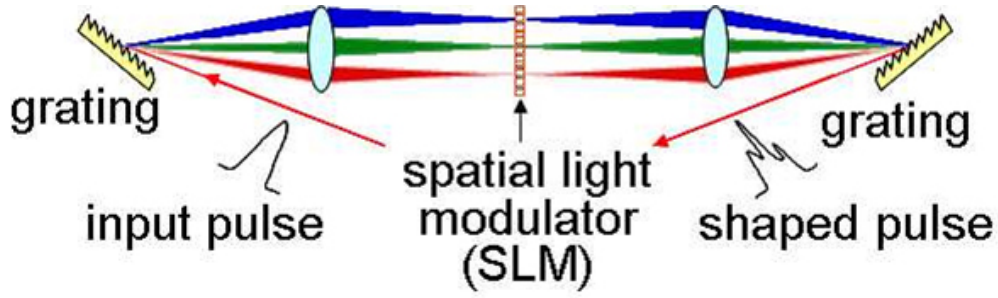


FIG. 2.8 – Schéma d'un dispositif de mise en forme d'une impulsion ultra-courte.

faisceau rectiligne. On peut donc façonner l'impulsion dans le domaine spectral comme on le souhaite. Il suffit donc de faire une transformée de Fourier inverse du champ laser spectral, pour avoir l'expression du champ laser temporel ainsi créé.

Pour implémenter le stirap parallèle, nous pouvons donc utiliser comme masques des modulateurs spatiaux de lumière à cristaux liquides. De tels modulateurs permettent indépendamment la mise en forme de la phase et de l'amplitude spectrales d'une impulsion femtoseconde [53, 54]. Nous considérons ici pour simplifier un écart à la résonance à deux photons constant ($\alpha = 0$). Dans ce cas, les deux impulsions lasers (Pompe et Stokes) peuvent être façonnées exactement de la même manière. La différence entre les deux champs est leur fréquence centrale et le délai entre les deux enveloppes. Toutefois, on peut déterminer approximativement les expressions des enveloppes lorsque $\alpha = 0$,

$$\Omega_{p,s}(t) \approx \frac{\Omega_0}{2} \beta e^{-[(t \pm 0.14T)/(\beta T)]^2}, \quad \beta = \sqrt{\frac{\pi}{2}}, \quad (2.22)$$

où les signes + et - sont attribués respectivement aux fréquences de Rabi Stokes et Pompe. Nous avons présenté dans la figure 2.9 les formes spectrales d'amplitudes $A_{p,s}(\omega)$ et de phases $\phi_{p,s}(\omega)$ qui permettent de produire les champs de la figure 2.4, définis à partir des champs complexes par la transformé de Fourier inverse

$$\varepsilon_{p,s} \Lambda_{p,s}(t) e^{i\varphi_{p,s}(t)} = \frac{1}{2\pi} \int d\omega A(\omega) e^{i[\omega t + \phi_{p,s}(\omega)]}, \quad (2.23)$$

où les paramètres $\varepsilon_{p,s}$, $0 \leq \Lambda_{p,s}(t) \leq 1$ et $\varphi_{p,s}(t)$ correspondent respectivement aux amplitudes, les enveloppes et les phases instantanées des champs lasers. Les fréquences instantanées associées aux champs laser Pompes et Stokes, définies respectivement par les relations

$$\omega_p(t) = \frac{d}{dt} \varphi_p(t) \quad (2.24a)$$

$$\omega_s(t) = \frac{d}{dt} \varphi_s(t), \quad (2.24b)$$

sont connectées aux écarts à la résonance à un et deux photons par les relations

$$\omega_p(t) = \omega_2 - \omega_1 - \Delta(t) \quad (2.25a)$$

$$\omega_s(t) = \omega_2 - \omega_3 + \delta(t) - \Delta(t). \quad (2.25b)$$

Nous avons choisi par commodité les fréquences centrales des lasers Pompe et Stokes comme

$$\omega_p(0) = \omega_2 - \omega_1 - \frac{\Omega_0}{4} \quad (2.26a)$$

$$\omega_s(0) = \omega_2 - \omega_3 + \frac{\Omega_0}{4}. \quad (2.26b)$$

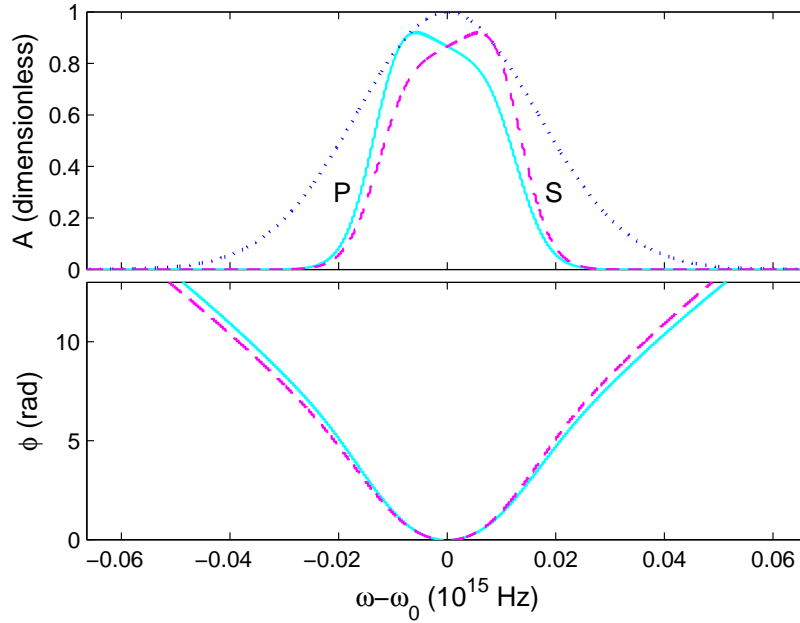


FIG. 2.9 – Les formes spectrales des amplitudes (en haut) et de phases (en bas) associées au laser Pompe (en trait plein) et Stokes (ligne en traits détachés) générées à partir d’une impulsion gaussienne limitée par transformée de Fourier centrée à $\omega = \omega_0$ et de largeur à mi-hauteur 100 fs (en haut, la courbe en pointillés), permettant de produire les champs lasers de la figure 2.4.

Pour chaque champ, les paramètres spectraux présentés dans la figure 1.9 ont été générées à partir d’une impulsion gaussienne limitée par transformée de Fourier¹ de fréquence centrale ω_0 et de largeur à mi-hauteur 100 fs dont la phase et l’amplitude ont été indépendamment mises en forme par deux modulateurs spatiaux de lumière à cristaux liquides. Pour une mise en oeuvre pratique, il peut être intéressant d’utiliser un chirp linéaire obtenu par linéarisation de l’équation (2.16) autour du point $t = 0$,

$$\Delta(t) = \frac{3\Omega_0}{2T\sqrt{\pi}}t \quad (2.27)$$

pour lequel $\sqrt{\Omega_p^2 + \Omega_s^2}$ est maximum. Ceci nous permet en effet, l’usage des réseaux optiques pour produire ce chirp au lieu des modulateurs. Dans ce cas, la durée de l’impulsion est connectée à la pente du chirp. L’efficacité du transfert de population par un écart à la résonance à un photon linéaire est montrée dans les figures (2.5) et (2.6) : elle n’est pas aussi efficace que la stratégie des lignes de niveau mais elle reste bien supérieure au processus stirap conventionnel. Par exemple, on peut voir que l’écart par rapport au transfert complet de population est déjà inférieur à 10^{-2} pour une aire totale d’environ 3.5π , ce qui correspond à une fluence totale de l’ordre de $10^{1.6}/T$. Par contre, nous retrouvons ces précisions pour le stirap conventionnel pour une aire totale d’impulsions laser plus grande que 10.5π ce qui correspond à une fluence totale plus grande que $10^{2.5}/T$ (environ un ordre de grandeur plus grand).

1. Une impulsion dite limitée par transformée de Fourier est une impulsion dont toutes les composantes spectrales sont présentes en même temps dans l’impulsion. Ce qui vient à dire que la phase des différentes composantes spectrales est une constante.

2.5 Conclusion et discussions

Nous avons développé une stratégie de passage adiabatique dans un système en Λ dont les paramètres de couplage sont conçus de telle sorte que les valeurs propres du système restent parallèles à chaque instant. Cette technique nous a permis de combiner à la fois l'efficacité énergétique des méthodes impulsions- π et la robustesse du passage adiabatique. Nous avons montré en particulier que cette stratégie est bien supérieure au processus stirap conventionnel en terme d'efficacité de transfert de population par rapport à l'aire totale d'impulsion. Cette technique est réalisable en utilisant les outils modernes de mise en forme d'impulsions.

Toutefois, la mise en oeuvre de la stratégie du passage adiabatique parallèle dans des systèmes réels peut être limitée par plusieurs obstacles tels que la présence d'autres états et les pertes dues à l'ionisation. Afin d'éviter ces limitations, nous devons considérer des systèmes dont l'état excité n'est pas couplé au continuum vis-à-vis de la résonance à un photon et d'utiliser des intensités modérées, généralement pas plus de 100 GW/cm^2 pour les atomes.

Nous avons supposé ici que les pertes par émission spontanée de l'état excité (de durée de vie en général de plusieurs nanosecondes dans les atomes) sont négligeables devant la durée du processus que l'on considère ici comme subpicoseconde. Toutefois, la prise en compte explicite de la dissipation devra être étudiée par la technique de passage adiabatique parallèle en vue de la minimisation de ces pertes. Les prochains chapitres traitent le passage adiabatique pour des systèmes en présence de la dissipation (systèmes ouverts).

La stratégie du passage adiabatique parallèle pourrait être adaptée pour produire d'une manière optimale une superposition d'états tel que le processus du STIRAP fractionnaire [49]. Cela devrait trouver des applications dans le domaine de l'information quantique comme par exemple l'implémentation de portes quantiques rapides ou encore construire des algorithmes quantiques [50].

Chapitre 3

Dynamique des systèmes quantiques ouverts

LES CHAPITRES précédents ont été consacrés à l'étude de l'évolution adiabatique des systèmes quantiques *fermés*, *i.e.* l'influence de l'environnement extérieur sur ces systèmes n'a pas été prise en compte. Cela s'est justifié en ne peuplant que des états métastables, *i.e.* des états de longue durée de vie, ou en effectuant un suivi adiabatique le long d'états sombres qui permettent de s'affranchir des effets dissipatifs dus à l'émission spontanée des états excités des atomes. L'étude des systèmes *ouverts* permet la prise en compte des différents effets dus à l'environnement. Ces effets décohérents engendrent une perte d'information sur la description du système. Son état ne peut plus être décrit par un état pur $|\Psi\rangle$ unique, mais par un ensemble statistique d'états $|\Psi_i\rangle$ pondérés par des probabilités p_i . L'étude du système se fait alors en général par l'intermédiaire de l'*opérateur densité* dont la dynamique est déterminée par l'équation de *Lindblad* [36, 37].

Cependant, il est souvent possible de décrire un système complexe par un Hamiltonien effectif ne tenant compte que des effets dominants de la dynamique. La dynamique du système donnée par l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien effectif est alors beaucoup plus simple à analyser. Les effets de la dissipation sur un sous-ensemble des états du système peuvent souvent s'exprimer par un Hamiltonien effectif non hermitien. Le taux de perte de population d'un état du système est ainsi traité comme une partie imaginaire de l'énergie associée à cet état, *i.e.* $E \rightarrow E - i\Gamma$, $\Gamma > 0$ [31]. L'Hamiltonien effectif est alors un opérateur non hermétique, *i.e.* $H_{eff} \neq H_{eff}^\dagger$. La résolution de l'équation de Schrödinger associée: $i\frac{d}{dt}U_{eff} = H_{eff}U_{eff}$ conduit alors à un opérateur d'évolution non-unitaire, traduisant la perte de population du système.

Dans la première section de ce chapitre, nous justifions ce formalisme pour un système à deux niveaux dont l'état excité est affecté par l'émission spontanée. En particulier, nous montrons comment l'Hamiltonien effectif peut être déduit directement à partir de l'équation de Lindblad. Les valeurs et vecteurs propres associés à cet Hamiltonien seront étudiés dans la seconde section. Dans la troisième section, nous traitons le cas où la dissipation est dépendante du temps. Une telle situation peut être envisagée dans un processus de transfert de population d'un état fondamental d'un atome à un état excité couplé à un continuum. Le modèle établi dans ce chapitre sera appliqué dans les chapitres suivants afin de décrire l'évolution adiabatique d'un système à deux niveaux soumis à la décohérence.

3.1 Équation de Lindblad et Hamiltonien effectif non-Hermitien

La dynamique des systèmes ouverts est en général décrite dans une approximation Markovienne par l'équation de Lindblad [36,37]

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H,\rho] + \frac{1}{2} \sum_i ([L_i, \rho L_i^\dagger] + [L_i \rho, L_i^\dagger]), \quad (3.1)$$

où interviennent les opérateurs H , ρ et L_i qui correspondent respectivement à l'Hamiltonien du système en absence de la dissipation, la matrice densité et les opérateurs de Lindblad décrivant l'interaction du système avec le milieu extérieur. Cependant, il est souvent plus commode de décrire un système complexe par une équation de Schrödinger avec un Hamiltonien effectif non-Hermitien ne tenant compte que des effets dominants de la dynamique. L'Hamiltonien effectif peut être en effet déduit de l'équation de Lindblad en faisant apparaître un anti-commutateur défini par

$$\{A,B\} = AB + BA \quad (3.2)$$

sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i[H,\rho] - \frac{1}{2} \sum_i \{L_i^\dagger L_i, \rho\} + \frac{1}{2} \sum_i L_i \rho L_i^\dagger \\ &= -i(H_{eff}\rho - \rho H_{eff}^\dagger) + \sum_i L_i \rho L_i^\dagger \end{aligned} \quad (3.3)$$

avec l'Hamiltonien effectif

$$H_{eff} = H - \frac{i}{2} \sum_i L_i^\dagger L_i. \quad (3.4)$$

La conservation de la population dans le système est prise en compte par le terme

$$\sum_i L_i \rho L_i^\dagger. \quad (3.5)$$

Dans certaines situations, la dynamique d'une partie des états du système définissant un sous espace Φ peut être décrite par l'équation de Schrödinger avec un Hamiltonien effectif non-Hermitien uniquement, quand (i) l'effet du terme (3.5) n'introduit sur cette partie du système que de la dissipation et pas de pompage depuis l'extérieur dans Φ et (ii) il n'y a pas de couplage par processus cohérent entre cette partie et les autres états du système. Dans ce cas, les autres états font partie de l'environnement du sous espace Φ . Illustrons ceci par l'exemple suivant. On considère un système à trois niveaux (voir Fig 3.1) dont l'état excité $|1\rangle$ d'énergie ω_1 (dans un système d'unités où $\hbar = 1$) émet spontanément vers un état intermédiaire $|2\rangle$ d'énergie ω_2 et que ce dernier émet aussi spontanément vers l'état fondamental $|0\rangle$ d'énergie ω_0 . Nous notons respectivement par Γ_d et Γ_p les taux de pertes de l'état $|1\rangle$ et $|2\rangle$. Les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont couplés par un laser de champ électrique $E(t) = \varepsilon(t) \cos(\omega t)$. L'Hamiltonien du système en absence de la dissipation s'écrit alors dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle\}$ dans l'approximation des ondes tournantes

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega}{2} & 0 \\ \frac{\Omega}{2} & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & \omega_2 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

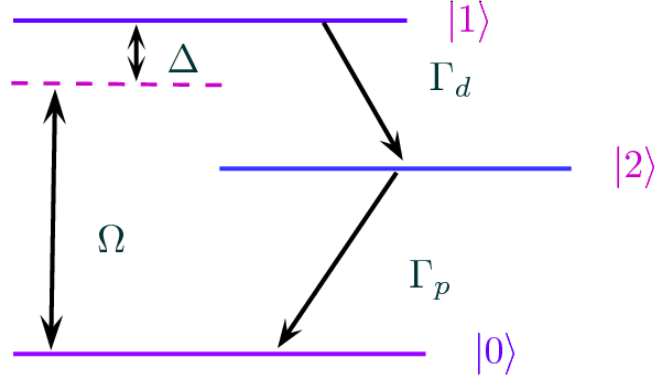


FIG. 3.1 – Un système à trois niveaux dont l'état excité $|1\rangle$ d'énergie ω_1 (dans un système d'unités où $\hbar = 1$) émet spontanément vers un état intermédiaire $|2\rangle$ d'énergie ω_2 et que ce dernier émet aussi spontanément vers l'état fondamental $|0\rangle$ d'énergie ω_0 . Nous notons respectivement par Γ_d et Γ_p les taux de pertes de l'état $|1\rangle$ et $|2\rangle$. Les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont couplés par un champ électrique de fréquence de Rabi Ω

où interviennent les paramètres Ω et Δ qui représentent respectivement la fréquence de Rabi définie comme l'interaction du champ électrique $\vec{E}(t)$ avec le moment dipolaire $\vec{\mu}$: $\Omega = -\vec{E}(t)\vec{\mu}$ et l'écart à la résonance défini par $\Delta = \omega_1 - \omega$. Les opérateurs de Lindblad tenant compte de l'émission spontanée du système s'écrivent

$$L_p = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{\Gamma_p} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad L_d = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\Gamma_d} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

On voit que ces opérateurs sont bien associés aux taux de transfert correspondant en les faisant agir sur les états subissant les pertes :

$$L_p|2\rangle = L_p \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\Gamma_p} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \sqrt{\Gamma_p}|0\rangle, \\ L_d|1\rangle = L_d \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \sqrt{\Gamma_d} \end{bmatrix} = \sqrt{\Gamma_d}|2\rangle. \quad (3.8)$$

La dynamique du système est donc décrite par l'équation de Lindblad

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i(H_{eff}\rho - \rho H_{eff}^\dagger) + L_p\rho L_p^\dagger + L_d\rho L_d^\dagger \quad (3.9)$$

avec

$$H_{eff} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega}{2} & 0 \\ \frac{\Omega}{2} & \Delta - i\frac{\Gamma_d}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \omega_2 - i\frac{\Gamma_p}{2} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

et

$$L_p \rho L_p^\dagger + L_d \rho L_d^\dagger = \begin{pmatrix} \Gamma_p \rho_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Gamma_d \rho_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Le terme $\Gamma_p \rho_{22}$ de l'équation (3.11) montre le gain de la population de l'état $|0\rangle$ correspondant à la population perdue par émission spontanée par l'état $|2\rangle$. Le terme $\Gamma_d \rho_{11}$ traduit le gain de la population de l'état $|2\rangle$ perdue par l'état excité $|1\rangle$. Dans le cas où $\Gamma_p = 0$, la dynamique du sous système composé par les états $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ peut être alors décrite de façon exacte par l'équation de Schrödinger avec l'Hamiltonien effectif non-Hermitien (3.10) restreint au sous espace $\Phi = \{|0\rangle, |1\rangle\}$:

$$H_{eff}^{(01)} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega}{2} \\ \frac{\Omega}{2} & \Delta - i\frac{\Gamma_d}{2} \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

car la dynamique dans le sous espace Φ s'écrit dans ce cas

$$\frac{d}{dt} \rho_{01}(t) = -i \left[H_{eff}^{(01)} \rho_{01} - \rho_{01} H_{eff}^{(01)\dagger} \right], \quad (3.13)$$

ou encore avec le formalisme de l'équation de Schrödinger

$$i \frac{d}{dt} |\Psi^{(01)}(t)\rangle = H_{eff}^{(01)}(t) |\Psi^{(01)}(t)\rangle \quad (3.14)$$

avec $\rho_{01} = |\Psi^{(01)}\rangle \langle \Psi^{(01)}|$. Il permet ainsi de décrire l'évolution de l'état $|1\rangle$ soumis à l'émission spontanée et qui émet vers un autre état *inclus dans l'environnement*. Notons que la population de l'état $|2\rangle$ est donnée par l'équation $\dot{\rho}_{22}(t) = \Gamma_d \rho_{11}(t)$ qui se résout directement à partir de l'état initial à $t = 0$:

$$\rho_{22}(t) = \rho_{22}(0) + \Gamma_d \int_0^t ds \rho_{11}(s). \quad (3.15)$$

Cependant, ce raisonnement ne peut pas s'appliquer à la dissipation par déphasage. En effet, considérons un système à deux niveaux soumis à la décohérence par déphasage. L'opérateur de Lindblad associé s'écrit dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$

$$L = \sqrt{\frac{\Gamma}{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

L'anti-commutateur de l'équation pilote de Lindblad s'écrit alors

$$-\frac{1}{2} \{L^\dagger L, \rho\} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Gamma \rho_{00} & \Gamma \rho_{01} \\ \Gamma \rho_{10} & \Gamma \rho_{11} \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

et le terme assurant la conservation de population s'écrit

$$L \rho L^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \Gamma \rho_{00} & -\Gamma \rho_{01} \\ -\Gamma \rho_{10} & \Gamma \rho_{11} \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

L'anti-commutateur (3.17) montre une perte de population sur chaque état, mais cette même population est regagnée par le terme (3.18). De plus, le terme (3.18) effectue la même perte de cohérence que l'anti-commutateur. Pour ces deux raisons, le terme (3.18) doit être pris en compte pour le traitement de la dissipation par déphasage, qui ne peut donc être traité par une équation de Schrödinger avec un Hamiltonien effectif non-Hermitien.

3.2 Vecteurs et valeurs propres du système

3.2.1 Cas d'un couplage réel

Considérons tout d'abord le cas lorsque le couplage Ω est réel. L'Hamiltonien (3.12) du système dissipatif est un opérateur non hermitien, pour lequel peuvent être définis des vecteurs propres droits $|\varphi_n^R\rangle$ et gauches $\langle\varphi_n^L|$ par les relations

$$H|\varphi_n^R\rangle = \lambda_n|\varphi_n^R\rangle \quad (3.19a)$$

$$\langle\varphi_n^L|H = \lambda_n\langle\varphi_n^L| \Leftrightarrow H^\dagger|\varphi_n^L\rangle = \lambda_n^*|\varphi_n^L\rangle \quad (3.19b)$$

où les symboles \dagger et $*$ désignent respectivement l'adjoint et le complexe conjugué et où on a noté par simplicité $H \equiv H_{eff}^{(01)}$. Les relations (3.19) impliquent l'identité

$$\langle\varphi_m^L|H|\varphi_n^R\rangle = \lambda_n\langle\varphi_m^L|\varphi_n^R\rangle = \lambda_m\langle\varphi_m^L|\varphi_n^R\rangle, \quad (3.20)$$

d'où l'égalité

$$(\lambda_n - \lambda_m)\langle\varphi_m^L|\varphi_n^R\rangle = 0, \quad (3.21)$$

qui mène à la relation d'orthogonalité

$$\langle\varphi_m^L|\varphi_n^R\rangle = 0 \quad \text{si} \quad \lambda_n \neq \lambda_m. \quad (3.22)$$

On peut imposer la normalisation

$$\langle\varphi_m^L|\varphi_n^R\rangle = \delta_{m,n}. \quad (3.23)$$

Notons que lorsque l'Hamiltonien du système est hermitien, les vecteurs propres instantanés droits et gauches sont identiques *i.e.* $|\varphi_n^L\rangle = |\varphi_n^R\rangle$. Afin de choisir les normes des vecteurs droits et gauches de façon appropriée, on définit l'angle complexe θ généralisant l'angle dynamique pour le cas des systèmes non dissipatifs à deux niveaux [42] par la relation

$$\tan \theta = \frac{\Omega}{-\Delta + i\Gamma} \quad (3.24)$$

avec $\Gamma = \frac{\Gamma_d}{2}$. Nous avons choisi¹ θ tel que $0 \leq \Re(\theta) < \pi$ pour Ω positive, plus précisément, $0 \leq \Re(\theta) < \pi/2$ pour Δ négative et $\pi/2 \leq \Re(\theta) < \pi$ pour Δ positive et $\pi \leq \Re(\theta) < 2\pi$ pour Ω négative, plus précisément, $\pi \leq \Re(\theta) < 3\pi/2$ pour Δ positive et $3\pi/2 \leq \Re(\theta) < 2\pi$ pour Δ négative. Ces conditions nous permettent de réécrire les vecteurs propres normalisés droits et gauches sous les formes simples

$$|\varphi_+^R\rangle = [\cos(\theta/2) \quad \sin(\theta/2)]^t \quad (3.25a)$$

$$|\varphi_-^R\rangle = [-\sin(\theta/2) \quad \cos(\theta/2)]^t \quad (3.25b)$$

$$\langle\varphi_+^L| = [\cos(\theta/2) \quad \sin(\theta/2)] \quad (3.25c)$$

$$\langle\varphi_-^L| = [-\sin(\theta/2) \quad \cos(\theta/2)]; \quad (3.25d)$$

où le symbole t désigne la transposé. Ils sont associés aux valeurs propres

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(\Delta - i\Gamma) \pm \frac{1}{2}\lambda \quad (3.26)$$

1. Les conditions choisies sur l'angle complexe θ sont justifiées en détail dans l'annexe B de ce chapitre.

avec

$$\lambda = \sqrt{(\Delta - i\Gamma)^2 + \Omega^2}. \quad (3.27)$$

La représentation matricielle de l'opérateur R diagonalisant à chaque instant l'Hamiltonien

$$R^{-1}HR = \text{diag}(\lambda_+, \lambda_-) \quad (3.28)$$

a alors pour vecteurs colonnes les vecteurs propres droits $|\varphi_n^R\rangle$, et son inverse R^{-1} a pour vecteurs lignes les vecteurs propres gauches $\langle\varphi_n^L|$. L'équation de Schrödinger

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} |\phi(\tau)\rangle = H(\tau) |\phi(\tau)\rangle \quad (3.29)$$

se réécrit dans la base adiabatique associée aux vecteurs propres instantanés sous la forme

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} |\phi^{(1)}(\tau)\rangle = H^{(1)}(\tau) |\phi^{(1)}(\tau)\rangle \quad (3.30)$$

avec le nouveau Hamiltonien

$$H^{(1)}(\tau) = R^{-1}(\tau)H(\tau)R(\tau) - i\epsilon R^{-1}(\tau) \frac{\partial}{\partial \tau} R(\tau) = \begin{pmatrix} \lambda_+(\tau) & i\epsilon\gamma(\tau) \\ -i\epsilon\gamma(\tau) & \lambda_-(\tau) \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

et la nouvelle fonction d'onde

$$|\phi^{(1)}(\tau)\rangle = R^{-1}(\tau) |\phi(\tau)\rangle. \quad (3.32)$$

Le terme γ dans l'équation (3.30) représente le couplage non adiabatique défini par

$$\gamma(\tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} \theta(\tau). \quad (3.33)$$

Nous remarquons ainsi que l'usage de l'angle complexe θ est très pratique vu qu'il nous permet une formule simple pour la normalisation des vecteurs propres et le calcul du couplage non adiabatique. Notons aussi que la définition (3.23) impose aux vecteurs propres d'être dans la condition du transport parallèle :

$$\langle\varphi_{\pm}^L(\tau)| \frac{\partial}{\partial \tau} |\varphi_{\pm}^R(\tau)\rangle = 0, \quad (3.34)$$

avec éventuellement l'ajout d'une phase de Berry si une boucle est considérée (voir la section 1.4 du chapitre 1).

3.2.2 Cas d'un couplage complexe

Pour un Hamiltonien non hermitien avec un couplage complexe *i.e.*

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega e^{-i\Theta} \\ \Omega e^{i\Theta} & \Delta - i\Gamma \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

où $\Theta(\tau)$ est une fonction lentement variable en fonction du temps, les vecteurs propres s'écrivent d'une manière générale

$$|\varphi_+^R\rangle = [\cos(\theta/2)e^{-i\Theta/2} \quad \sin(\theta/2)e^{i\Theta/2}]^t, \quad (3.36a)$$

$$|\varphi_-^R\rangle = [-\sin(\theta/2)e^{-i\Theta/2} \quad \cos(\theta/2)e^{i\Theta/2}]^t, \quad (3.36b)$$

$$\langle\varphi_+^L| = [\cos(\theta/2)e^{i\Theta/2} \quad \sin(\theta/2)e^{-i\Theta/2}], \quad (3.36c)$$

$$\langle\varphi_-^L| = [-\sin(\theta/2)e^{i\Theta/2} \quad \cos(\theta/2)e^{-i\Theta/2}]. \quad (3.36d)$$

Cependant, un calcul élémentaire montre que l'écriture (3.36) des vecteurs propres n'assure pas le transport parallèle au cours de la dynamique. En effet,

$$\langle\varphi_\pm^L(\tau)| \frac{\partial}{\partial\tau} |\varphi_\pm^R(\tau)\rangle = \mp i \frac{\dot{\Theta}}{2} \cos\theta. \quad (3.37)$$

Toutefois, on peut définir les vecteurs propres (3.36) dans la condition du transport parallèle par l'ajout d'une phase μ qui compense les termes non nuls (3.37) définie comme

$$\mu(\tau) = \int_{-\infty}^{\tau} \frac{\dot{\Theta}(s)}{2} \cos\theta(s) ds. \quad (3.38)$$

Les vecteurs propres se réécrivent donc sous la condition du transport parallèle

$$|\varphi_+^R\rangle = [\cos(\theta/2)e^{-i\Theta/2} \quad \sin(\theta/2)e^{i\Theta/2}]^t e^{i\mu}, \quad (3.39a)$$

$$|\varphi_-^R\rangle = [-\sin(\theta/2)e^{-i\Theta/2} \quad \cos(\theta/2)e^{i\Theta/2}]^t e^{-i\mu}, \quad (3.39b)$$

$$\langle\varphi_+^L| = [\cos(\theta/2)e^{i\Theta/2} \quad \sin(\theta/2)e^{-i\Theta/2}] e^{-i\mu}, \quad (3.39c)$$

$$\langle\varphi_-^L| = [-\sin(\theta/2)e^{i\Theta/2} \quad \cos(\theta/2)e^{-i\Theta/2}] e^{i\mu}. \quad (3.39d)$$

3.3 Couplage d'un état discret à un continuum

Dans cette section, nous étudions le cas lorsque l'état excité d'un système à deux niveaux est couplé au continuum par une transition à un photon [30,31]. Nous montrons en particulier, que ce système peut être décrit par un Hamiltonien effectif dont le taux de perte de l'état excité est traité comme une partie imaginaire dépendante du temps de l'énergie associée à cet état *i.e.* $E \rightarrow E - i\Gamma(t)$. La figure 3.2 montre un état excité $|1\rangle$ couplé à un continuum via à un laser $E(t) = E_0(t) \cos(\omega_L t + \phi(t))$, où l'amplitude $E_0(t)$ et la phase $\phi(t)$ sont des fonctions lentement variables en fonction du temps. La fréquence centrale du laser est donnée par ω_L . Les états $|0\rangle$, $|1\rangle$ sont les vecteurs propres d'un Hamiltonien non perturbé H_0 vérifiant $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ et $|c,\epsilon\rangle$ sont les vecteurs propres généralisés du continuum vérifiant $\langle c,\epsilon_i|c,\epsilon_j\rangle = \delta(\epsilon_i - \epsilon_j)$ et où on suppose $\epsilon > 0$. La fonction d'onde du système s'écrit dans la base $\{|0\rangle, |1\rangle, |c,\epsilon\rangle\}$

$$|\Psi(t)\rangle = a_0(t)|0\rangle + a_1(t)|1\rangle + \int_0^{+\infty} d\epsilon a_\epsilon(t)|c,\epsilon\rangle, \quad (3.40)$$

solution de l'équation de Schrödinger

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = [H_0 + V(t)] |\Psi(t)\rangle, \quad (3.41)$$

où $V(t)$ représente l'énergie d'interaction du laser avec le moment dipolaire électrique $\vec{\mu}$. En remplaçant l'équation (3.41) dans (3.40), les équations du mouvement des amplitudes de

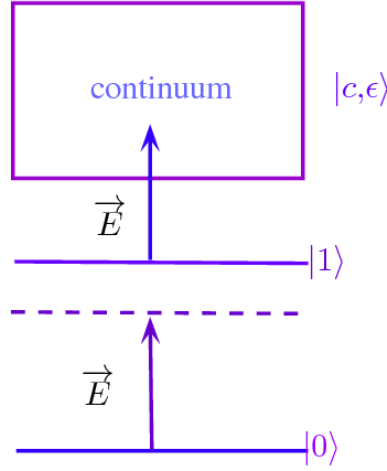


FIG. 3.2 – Schéma d'un système à deux niveaux dont l'état excité est couplé à un continuum via transition à un photon. Les états $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont couplés par un laser $E(t) = E_0(t) \cos(\omega_L t + \phi(t))$.

probabilités s'écrivent

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_0(t) = \omega_0 a_0(t) - \Omega_{01}(t) \cos(\omega_L t + \phi(t)) a_1(t), \quad (3.42a)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_1(t) = -\Omega_{10}(t) \cos(\omega_L t + \phi(t)) a_0(t) + \omega_1 a_1(t) - \int_0^{+\infty} d\epsilon a_\epsilon(t) \Omega_{1\epsilon}(t) \cos(\omega_L t + \phi(t)), \quad (3.42b)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} a_\epsilon(t) = -\Omega_{\epsilon 1}(t) a_1(t) \cos(\omega_L t + \phi(t)) + \omega_\epsilon a_\epsilon(t), \quad (3.42c)$$

où ω_0 , ω_1 et ω_ϵ représentent respectivement les énergies des états $|0\rangle$, $|1\rangle$ et $|\epsilon\rangle$ et Ω_{ij} , $(i,j) = \{0,1,\epsilon\}$ sont les fréquences de Rabi définies par $\Omega_{ij} = -\langle i | \vec{E}_0 \cdot \vec{\mu} | j \rangle$. En posant maintenant $c_j(t) = e^{i\omega_j t} a_j(t)$, $j = 0,1,\epsilon$ et en appliquant l'approximation des ondes tournantes, les équations (3.42) se réécrivent

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_0(t) = -\frac{1}{2} \Omega_{01}(t) \exp\{i\phi(t) - i\Delta_L t\} c_1(t), \quad (3.43a)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_1(t) = -\frac{1}{2} \Omega_{10}(t) c_0(t) \exp\{-i\phi(t) + i\Delta_L t\} - \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} d\epsilon c_\epsilon(t) \Omega_{1\epsilon}(t) \exp\{i\phi(t) - i\Delta_\epsilon t\}, \quad (3.43b)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} c_\epsilon(t) = -\frac{1}{2} \Omega_{\epsilon 1}(t) \exp\{-i\phi(t) + i\Delta_\epsilon t\} c_1(t), \quad (3.43c)$$

où interviennent les paramètres Δ_L et Δ_ϵ définis comme $\Delta_L = \omega_1 - \omega_L - \omega_0$ et $\Delta_\epsilon = \omega_\epsilon - \omega_1 - \omega_L$. Dans la suite, nous supposons que le système est initialement connecté à l'état $|0\rangle$, *i.e.* $c_\epsilon(t=0) = c_1(t=0) = 0$ et $c_0(t=0) = 1$. Intégrant l'équation (3.43c) par rapport au temps et substituant le résultat dans l'équation (3.43b), on obtient pour le coefficient c_1 :

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}c_1(t) &= -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)c_0(t)\exp\{-i\phi(t) + i\Delta_L t\} \\
&\quad - \frac{i}{4}\int_0^{+\infty} d\epsilon \int_0^t \Omega_{1\epsilon}(t)\Omega_{\epsilon 1}(t')\exp\{+i(\phi(t) - \phi(t')) - i\Delta_\epsilon(t - t')\}c_1(t')dt'
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Il est en général difficile de traiter l'équation (3.44) à moins que l'approximation de Markov [29,32] soit faite. Cela se justifie comme suit : supposons que l'élément de matrice $\Omega_{\epsilon 1}$ dépendant lentement de ϵ , possède une largeur $\sim \sigma$. Le terme en exponentielle $\exp\{-i\Delta_\epsilon(t - t')\}$ oscille en ϵ avec une période $\sim 2\pi(t - t')$. L'intégrale sur ϵ est donc nulle sauf si cette période est de l'ordre de σ . Ainsi, la seule contribution non nulle est lorsque $|t - t'| \lesssim \frac{2\pi}{\sigma}$. Dans l'approximation de Markov, $\Omega_{1\epsilon}$ est supposé plat en ϵ i.e. $\sigma \rightarrow \infty$ et la seule contribution est donc à $t = t'$. Par conséquent, l'équation (3.44) se réécrit dans cette approximation

$$\begin{aligned}
i\frac{\partial}{\partial t}c_1(t) &= -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)c_0(t)\exp\{-i\phi(t) + i\Delta_L t\} \\
&\quad - \frac{i}{4}c_1(t)\int_0^{+\infty} d\epsilon|\Omega_{1\epsilon}|^2\int_0^t dt'\exp\{-i\Delta_\epsilon(t - t')\}.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Vu que pour $|t - t'| > \frac{2\pi}{\sigma}$, l'intégrale par rapport à la variable ϵ est nulle, l'intégrale par rapport à la variable t' peut être approximée en l'évaluant sur l'intervalle $] - \infty, t]$. En posons $T = t - t'$, on obtient

$$\int_{-\infty}^t dt'\exp\{-i\Delta_\epsilon(t - t')\} = \int_0^{+\infty} dT\exp\{-i\Delta_\epsilon T\} = -iP\left(\frac{1}{\Delta_\epsilon}\right) + \pi\delta(\Delta_\epsilon), \tag{3.46}$$

où P et δ désignent respectivement la partie principale et la fonction delta de Dirac [29]. Tenant compte du résultat (3.46), l'équation (3.45) se réécrit

$$i\frac{\partial}{\partial t}c_1(t) = -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)c_0(t)\exp\{-i\phi(t) + i\Delta_L t\} - \frac{i}{4}c_1(t)\int_0^{+\infty} d\epsilon|\Omega_{1\epsilon}|^2\left[-iP\left(\frac{1}{\Delta_\epsilon}\right) + \pi\delta(\Delta_\epsilon)\right], \tag{3.47}$$

soit

$$i\frac{\partial}{\partial t}c_1(t) = -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)c_0(t)\exp\{-i\phi(t) + i\Delta_L t\} - c_1(t)\left\{P\left(\int_0^{+\infty} d\epsilon\frac{|\Omega_{1\epsilon}|^2}{4\Delta_\epsilon}\right) + i\pi\frac{|\Omega_{1\epsilon_i}|^2}{4}\right\} \tag{3.48}$$

avec $\epsilon_i = \omega_1 + \omega_L$. La quantité $\delta E = P\left(\int_0^{+\infty} d\epsilon\frac{|\Omega_{1\epsilon}|^2}{4\Delta_\epsilon}\right)$ contribue seulement à une phase et n'affecte donc pas la population, causant ainsi un déplacement d'énergie connu sous le nom de *décalage Stark*. En revanche, le terme $\Gamma(t) = \pi\frac{|\Omega_{1\epsilon_i}|^2}{4}$ est une dissipation due à l'interaction de l'état excité avec le continuum. La dynamique du système peut donc être décrite par le système d'équations suivant

$$i\frac{\partial}{\partial \tau}\begin{bmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}\Omega_{01}(t)e^{i(\phi(t) - \Delta_L t)} \\ -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)e^{-i(\phi(t) - \Delta_L t)} & -\delta E - i\Gamma(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{bmatrix}. \tag{3.49}$$

En posant

$$\tilde{c}_0(t) = e^{\frac{i}{2}\Delta_L t} \tag{3.50a}$$

$$\tilde{c}_1(t) = e^{-\frac{i}{2}\Delta_L t}, \tag{3.50b}$$

le système (3.49) se réécrit

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \begin{bmatrix} \tilde{c}_0(t) \\ \tilde{c}_1(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2}\Delta_L & -\frac{1}{2}\Omega_{01}(t)e^{i\phi(t)} \\ -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)e^{-i\phi(t)} & \frac{1}{2}\Delta_L - \delta E - i\Gamma(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{c}_0(t) \\ \tilde{c}_1(t) \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

$$= -\frac{1}{2}\Delta_L \mathbb{1}_2 + \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}\Omega_{01}(t)e^{i\phi(t)} \\ -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)e^{-i\phi(t)} & \Delta - i\Gamma(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{c}_0(t) \\ \tilde{c}_1(t) \end{bmatrix}, \quad (3.52)$$

avec $\Delta = \Delta_L - \delta E$. La quantité $-\frac{1}{2}\Delta_L$ contribue seulement à une phase globale et n'affecte pas la population. Dans la suite, nous utiliserons l'Hamiltonien H_{eff} donné par

$$H_{eff} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{2}\Omega_{01}(t)e^{i\phi(t)} \\ -\frac{1}{2}\Omega_{10}(t)e^{-i\phi(t)} & \Delta - i\Gamma(t) \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

pour décrire la dynamique adiabatique d'un système dissipatif.

3.4 Conclusion

Nous avons montré dans ce chapitre que, sous certaines conditions, il est possible de décrire un système dissipatif par une équation de Schrödinger avec un Hamiltonien effectif ne tenant compte que des effets dominants de la dynamique. En effet, les effets de la dissipation sur le système peuvent s'exprimer par un Hamiltonien non hermitien dont le taux de perte de population d'un état excité est traité comme une partie imaginaire de l'énergie associée à cette état. Nous avons montré également que le taux de la dissipation peut être dépendant du temps. Une telle situation est envisagée dans un processus de transfert de population d'un état fondamental d'un atome à un état excité couplé au continuum. Dans les chapitres qui suivent, nous allons utiliser ces Hamiltoniens effectifs pour décrire l'évolution adiabatique des systèmes dissipatifs à deux niveaux.

– RÉSUMÉ DU CHAPITRE 3 –

OBJECTIF : Ce chapitre décrit le formalisme utilisé pour le traitement des systèmes quantiques dissipatifs.

ÉQUATION PILOTE : L'opérateur densité du système couplé à un environnement évolue dans la limite de Markov suivant l'équation pilote de Lindblad

$$\frac{d\rho}{dt} - \frac{i}{\hbar}[H, \rho] + \frac{1}{2} \sum \left([L_i, \rho L_i^\dagger] + [L_i \rho, L_i^\dagger] \right), \quad (3.54)$$

où les opérateurs L_i décrivent les effets dissipatifs.

- Dans certaines situations, la dynamique d'une partie des états du système définissant un sous espace Φ , peut être décrite par l'équation de Schrödinger avec un Hamiltonien effectif non hermitien uniquement quand

1. Les autres états du système définissant l'environnement n'introduisent que de la dissipation sur le sous espace Φ .
2. Il n'y a pas de couplage par processus cohérent entre cette partie et l'environnement.

L'Hamiltonien effectif peut se déduire dans ce cas à partir de l'équation de Lindblad en faisant apparaître un anti-commutateur

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) &= -i[H, \rho] - \frac{1}{2} \sum_i \{L_i^\dagger L_i, \rho\} + \frac{1}{2} \sum_i L_i \rho L_i^\dagger \\ &= -i(H_{eff} \rho - \rho H_{eff}^\dagger) + \sum_i L_i \rho L_i^\dagger \end{aligned} \quad (3.55)$$

avec l'Hamiltonien effectif

$$H_{eff} = H - \frac{i}{2} \sum_i L_i^\dagger L_i \quad (3.56)$$

- Le taux de perte de population d'un état du système est traitée dans ce cas comme une partie imaginaire associée à cet état.

- Dans un processus de transfert de population de l'état fondamental d'un atome à un état excité couplé au continuum, la dynamique du système peut être décrite par un Hamiltonien effectif dont le taux de perte de population de l'état excité est traité comme une partie imaginaire dépendante du temps.

Annexe B

L'angle complexe θ

Dans cet appendice nous justifions les conditions choisies sur l'angle complexe θ . Considérons tout d'abord l'Hamiltonien

$$H = \begin{pmatrix} 0 & \Omega/2 \\ \Omega/2 & \Delta - i\Gamma \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1})$$

Les valeurs propres de l'Hamiltonien (B.1) s'écrivent

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(\Delta - i\Gamma) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\Delta - i\Gamma)^2 + \Omega^2}. \quad (\text{B.2})$$

Elles sont associées aux vecteurs propres normalisés

$$|\varphi_+^{(R)}\rangle = C \begin{bmatrix} \Omega \\ 2\lambda_+ \end{bmatrix}, \quad |\varphi_-^{(R)}\rangle = -C \begin{bmatrix} 2\lambda_+ \\ -\Omega \end{bmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

où la quantité C est définie par

$$C = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{1}{(\Omega^2 + (\Delta - i\Gamma)^2)^{\frac{1}{4}}} \right] \left[\frac{1}{\sqrt{\sqrt{\Omega^2 + (\Delta - i\Gamma)^2} + \Delta - i\Gamma}} \right]. \quad (\text{B.4})$$

Les écritures (B.3) des vecteurs propres sont peu pratiques vu qu'elles conduisent à des expressions compliquées pour le calcul du couplage non adiabatique. On peut cependant simplifier ces expressions si nous définissons l'angle complexe θ par la relation

$$\tan \theta = \frac{\Omega}{-\Delta + i\Gamma}. \quad (\text{B.5})$$

Les vecteurs propres (B.3) se réécrivent alors

$$|\varphi_+^{(R)}\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}, \quad |\varphi_-^{(R)}\rangle = \begin{bmatrix} -\sin(\theta/2) \\ \cos(\theta/2) \end{bmatrix}. \quad (\text{B.6})$$

Toutefois, l'écriture (B.6) exige des conditions sur l'angle complexe θ afin que le vecteur propre $|\varphi_+^{(R)}(\theta)\rangle$ (respectivement $|\varphi_-^{(R)}(\theta)\rangle$) soit toujours associé à la valeur propre λ_+ (respectivement λ_-). En effet, la définition (B.5) donne

$$\cos(\theta) = \pm \frac{-\Delta + i\Gamma}{\sqrt{\Omega^2 + (-\Delta + i\Gamma)^2}}, \quad \sin(\theta) = \pm \frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (-\Delta + i\Gamma)^2}}. \quad (\text{B.7})$$

On voit donc bien que le choix de signe dépend du choix de $\sqrt{z^2} = +z$ ou $-z$ pour $z = \{\Delta - i\Gamma, \Omega\}$. Supposons d'abord qu'on a choisi le signe $+$, alors on montre dans ce cas que le vecteur propre $|\varphi_+^{(R)}(\theta)\rangle$ (respectivement $|\varphi_-^{(R)}(\theta)\rangle$) correspond bien à la valeur propre λ_+ (respectivement λ_-). En revanche, si on choisit $\sqrt{z^2} = -z$, alors un calcul élémentaire montre maintenant que $|\varphi_+^{(R)}(\theta)\rangle$ (respectivement $|\varphi_-^{(R)}(\theta)\rangle$) est associé à la valeur propre λ_- (respectivement λ_+). Cette dernière remarque est non triviale car elle montre l'ambiguïté de l'étiquetage des valeurs propres au cours du temps. On rappelle que pour le cas des systèmes non dissipatif *i.e.* $\Gamma = 0$, l'angle dynamique θ est défini par la relation

$$\tan \theta = -\frac{\Omega}{\Delta}, \quad (\text{B.8})$$

ce qui correspond à

$$\sin \theta = \frac{\Omega}{\sqrt{\Delta^2 + \Omega^2}}, \quad (\text{B.9})$$

avec le choix $0 \leq \theta < \pi$ pour $\Omega \geq 0$ et $\pi \leq \theta < 2\pi$ pour $\Omega < 0$. L'idée consiste alors à généraliser cette analyse aux cas des systèmes dissipatifs. Plus précisément, nous devons fixer le domaine de variation de la partie réelle de l'angle complexe θ au cours de la dynamique pour chaque choix du signe. Dans la suite, nous allons choisir le signe $+$ pour le sinus, *i.e.*

$$\sin \theta = +\frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (-\Delta + i\Gamma)^2}}. \quad (\text{B.10})$$

En posant $\theta = \theta_R + i\theta_I$, on peut écrire

$$\sin(\theta_R + i\theta_I) = +\frac{\Omega}{\sqrt{\Omega^2 + (-\Delta + i\Gamma)^2}} \quad (\text{B.11a})$$

$$= \frac{\Omega}{\sqrt{a + ib}} \quad (\text{B.11b})$$

$$= \frac{\Omega}{\alpha + i\beta} \quad (\text{B.11c})$$

$$= \frac{\Omega\alpha}{\alpha^2 + \beta^2} - i\frac{\Omega\beta}{\alpha^2 + \beta^2}, \quad (\text{B.11d})$$

où les quantités a , b , α et β sont définies par les relations

$$a = \Omega^2 + \Delta^2 - \Gamma^2, \quad (\text{B.12a})$$

$$b = -2\Gamma\Delta, \quad (\text{B.12b})$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{a + \sqrt{a^2 + b^2}}, \quad (\text{B.12c})$$

$$\beta = \frac{\text{sgn}(b)}{\sqrt{2}}\sqrt{-a + \sqrt{a^2 + b^2}}. \quad (\text{B.12d})$$

Notons que nous avons ici fait le choix habituel pour la définition de la racine carrée :

$$\sqrt{a + ib} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{a + \sqrt{a^2 + b^2}} + i\frac{\text{sgn}(b)}{\sqrt{2}}\sqrt{-a + \sqrt{a^2 + b^2}} \quad (\text{B.13})$$

En développant $\sin(\theta_R + i\theta_I)$ sous la forme

$$\sin(\theta_R + i\theta_I) = \sin \theta_R \cosh \theta_I + i \cos \theta_R \sinh \theta_I, \quad (\text{B.14})$$

et en comparant avec l'équation (B.11d), on déduit

$$\sin \theta_R \cosh \theta_I = \frac{\Omega \alpha}{\alpha^2 + \beta^2} \quad (\text{B.15a})$$

$$\cos \theta_R \sinh \theta_I = -\frac{\Omega \beta}{\alpha^2 + \beta^2}. \quad (\text{B.15b})$$

L'équation (B.15a) montre alors que si le couplage est positive *i.e.* $\Omega \geq 0$, la partie réelle θ_R varie dans l'intervalle: $0 \leq \theta_R < \pi$ car α est positif par définition. Si le couplage est négative, alors $\pi \leq \theta_R < 2\pi$. D'autre part, l'équation (B.15b) montre que le signe de $\cos \theta_R$ dépend du choix de signe de Δ . En effet, en utilisant le fait que $\Gamma > 0$, on a

$$\sinh \theta_I = \frac{\Omega \text{sgn}(\Delta)}{\sqrt{2}(\alpha^2 + \beta^2) \cos \theta_R} \sqrt{-a + \sqrt{a^2 + b^2}}. \quad (\text{B.16})$$

Comme $\theta_I \leq 0$, autrement dit $\sinh \theta_I \leq 0$, alors si $\Delta > 0$, alors $\frac{\pi}{2} \leq \theta_R < \pi$. Mais si $\Delta < 0$, alors $0 \leq \theta_R < \frac{\pi}{2}$ pour $\Omega > 0$. Si maintenant $\Omega < 0$, alors $\pi \leq \theta_R < \frac{3\pi}{2}$ pour $\Delta > 0$ et $\frac{3\pi}{2} \leq \theta_R < 2\pi$ pour $\Delta < 0$.

On peut obtenir le signe de θ_I en développant

$$\cos(\theta_R + i\theta_I) = \cos \theta_R \cosh \theta_I - i \sin \theta_R \sinh \theta_I, \quad (\text{B.17})$$

donnant

$$\begin{aligned} \sin \theta_R \sinh \theta_I &= -\Im \left(\frac{-\Delta + i\Gamma}{\sqrt{\Omega^2 + (-\Delta + i\Gamma)^2}} \right) \\ &= -\frac{\alpha\Gamma + \Delta\beta}{\alpha^2 + \beta^2} \\ &= -\frac{\alpha\Gamma - |\Delta||\beta|}{\alpha^2 + \beta^2}. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Comme $\alpha\Gamma - |\Delta||\beta| > 0$, alors si $0 < \theta_R < \pi$, alors $\theta_I < 0$ et si $\pi < \theta_R < 2\pi$, alors $\theta_I > 0$. Donc d'après (B.16) si $\Omega > 0$ (ie $\theta_I < 0$), alors on a $0 < \theta_R < \pi/2$ si $\Delta < 0$ et $\pi/2 < \theta_R < \pi$ si $\Delta > 0$. Mais si $\Omega < 0$ (ie $\theta_I > 0$), alors on a $\pi < \theta_R < 3\pi/2$ si $\Delta > 0$ et $3\pi/2 < \theta_R < 2\pi$ si $\Delta < 0$.

Chapitre 4

Passage adiabatique dans le plan complexe : Application aux systèmes quantiques dissipatifs à deux niveaux.

LE PASSAGE adiabatique est une technique largement utilisée en mécanique quantique [10], notamment en ce qui concerne les manipulations cohérentes des atomes et des molécules par des impulsions lasers mises en forme [1, 52, 60, 61]. Outre la preuve formelle du théorème adiabatique, une étape importante consiste à la détermination des corrections non-adiabatiques à la fin du processus. Ainsi, peu après la formulation du théorème adiabatique, Zener [94] et Majorana [95] ont établi une formule qui donne la probabilité de transition dans la limite adiabatique pour un système particulier à deux niveaux pour lequel ils ont trouvé une solution analytique exacte de l'équation de Schrödinger. Cette formule a été obtenue indépendamment par Landau [96] qui a introduit une méthode très puissante qui consiste à intégrer l'équation de Schrödinger le long d'un chemin dans le plan complexe entourant le point de croisement des valeurs propres du système. Suivant l'idée originale de Landau, Dykhne [97] a pu généraliser la formule Landau-Zener à des systèmes décrits par des Hamiltoniens réels et symétriques. Il a proposé ainsi la formule

$$P(\epsilon) \simeq \exp\left(\frac{2}{\epsilon} \Im \left[\int_{\gamma} (e_1(z) - e_2(z)) dz \right]\right), \quad \epsilon \mapsto 0 \quad (4.1)$$

où γ est un chemin dans le plan complexe qui relie l'axe réel au point z_0 défini comme un point de croisement des valeurs propres *i.e.* $e_1(z_0) - e_2(z_0) = 0$. Cette formule a été finalement rigoureusement justifiée par Davis et Pechukas, et Hwang et Pechukas [5, 6, 41] et généralisée par A. Joye [38, 39]. Récemment, il a été montré que la formule de Davis-Dykhne-Pechukas (D.D.P) peut être étendue aux systèmes dissipatifs à deux niveaux [45], même pour une forte dissipation [42]. Dans ce chapitre, nous montrons la validité de cette extension en utilisant la méthode du temps complexe développée dans les références [38, 39, 90].

4.1 Le modèle

4.1.1 Définition

Dans la suite, nous considérons l'Hamiltonien (3.35) décrit dans le chapitre précédent avec un couplage complexe:

$$\hat{H} = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} 0 & \Omega e^{-i\Theta} \\ \Omega e^{i\Theta} & 2(\Delta - i\Gamma) \end{bmatrix}, \quad (4.2)$$

où $\Theta(t)$ est une fonction qui varie lentement en fonction du temps. Nous considérons en particulier le cas le plus général lorsque le taux de la dissipation dépend du temps *i.e.* $\Gamma \equiv \Gamma(t)$. Nous rappelons qu'une telle situation peut être envisagée dans un processus de transfert de population d'un état fondamental d'un atome à un état excité couplé au continuum (voir section 3.3). Afin d'étendre la formulation du théorème adiabatique [5,6,38–41] à des systèmes dissipatifs, nous décomposons d'abord l'Hamiltonien en une partie proportionnelle à l'identité et une partie à trace nulle, soit

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\Delta - i\Gamma)\mathbb{1}_2 + H \quad (4.3)$$

avec

$$H = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -(\Delta - i\Gamma) & \Omega e^{-i\Theta} \\ \Omega e^{i\Theta} & (\Delta - i\Gamma) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{B_3}{2} & \frac{B_1 - iB_2}{2} \\ \frac{B_1 + iB_2}{2} & -\frac{B_3}{2} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

Nous analysons d'abord le passage adiabatique avec l'Hamiltonien H . La connection avec le modèle initial est la suivante : si nous notons respectivement par $\tilde{\psi}(t)$ et $\tilde{\phi}(t)$ les solutions de l'équation de Schrödinger avec respectivement les Hamiltoniens \hat{H} et H alors on a

$$\tilde{\psi}(t) = e^{-\frac{i}{2} \int_{-\infty}^t ds(\Delta(s) - i\Gamma(s))} \tilde{\phi}(t). \quad (4.5)$$

Pour des considérations mathématiques du théorème adiabatique, il est plus pratique d'introduire explicitement la vitesse de la dynamique à travers un temps caractéristique T du système qui peut être la durée de l'impulsion par exemple. On définit le temps normalisé $\tau = \frac{t}{T} = \epsilon t$, $\epsilon = \frac{1}{T}$ vérifiant $\tilde{\phi}(t) = \psi(\tau)$ et $\tilde{\phi}(t) = \phi(\tau)$. Une évolution adiabatique ayant lieu lorsque T tend vers l'infini. Cela correspond alors à une évolution lente au cours du temps. Dans la suite, on considère un couplage symétrique de la forme $\Omega(\tau) = \Omega_0 \Lambda(\tau)$ vérifiant $\Lambda(\pm\infty) = 0$ et nous utilisons les notations $\Delta_{\pm} \equiv \Delta(\pm\infty)$ et $\Gamma_{\pm} \equiv \Gamma(\pm\infty)$.

4.1.2 Les bases adiabatiques du système

L'Hamiltonien (4.4) est un opérateur non hermitien qui génère deux ensembles de vecteurs propres droites et gauches qui vérifient

$$\langle \varphi_{\alpha}^L | \varphi_{\beta}^R \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_{\alpha} | \varphi_{\alpha}^R \rangle \langle \varphi_{\alpha}^L | = 1. \quad (4.6)$$

et

$$H | \varphi_{\pm}^{(R)} \rangle = \lambda_{\pm} | \varphi_{\pm}^{(R)} \rangle, \quad (4.7a)$$

$$H^{\dagger} | \varphi_{\pm}^{(L)} \rangle = \lambda_{\pm}^* | \varphi_{\pm}^{(L)} \rangle. \quad (4.7b)$$

Les vecteurs propres normalisés (4.7) sont donnés par les équations (3.39) du chapitre précédent en fonction de l'angle dynamique complexe θ . Nous rappelons que l'usage de cet angle complexe impose aux vecteurs propres (4.7) d'être dans la condition de transport parallèle

$$\langle \varphi_\alpha^L(\tau) | \frac{\partial}{\partial \tau} | \phi_\alpha^R(\tau) \rangle = 0. \quad (4.8)$$

Les valeurs propres λ_\pm s'écrivent

$$\lambda_\pm = \frac{1}{2} \sqrt{\rho}, \quad \rho = (\Delta - i\Gamma)^2 + \Omega^2 \quad (4.9)$$

où la racine carée est définie comme

$$\sqrt{\rho} \equiv \sqrt{\alpha + i\beta} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{|\rho| + \alpha} + i \operatorname{sgn}(\beta) \sqrt{|\rho| - \alpha} \right], \quad (4.10)$$

où sgn est la fonction signe et les paramètres α et β sont donnés par

$$\alpha = \Delta^2 + \Omega^2 - \Gamma^2 \quad (4.11a)$$

$$\beta = -2\Gamma\Delta. \quad (4.11b)$$

On voit bien d'après les équations (4.10) et (4.11) que les signes des parties imaginaires des valeurs propres (4.9) dépendent du signe de Δ . En particulier si l'écart à la résonance change de signe au cours du temps alors les parties imaginaires des valeurs propres se croisent. On montre qu'une telle situation mène en général à une transition¹ entre un état initial et un état final dans la limite adiabatique. En revanche, si l'écart à la résonance garde un signe constant tout au long de la dynamique, alors les parties imaginaires des valeurs propres ne se croisent pas et la dynamique ne mène pas à un transfert de population à la fin de l'interaction.

On note maintenant par $|\phi(\tau)\rangle$ la fonction d'onde du système, solution de l'équation de Schrödinger

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} |\phi(\tau)\rangle = H(\tau) |\phi(\tau)\rangle. \quad (4.12)$$

Dans la suite, nous écrivons la fonction d'onde dans la base adiabatique sous la forme

$$|\phi(\tau)\rangle = \sum_{j=\pm} b_j(\tau) |\varphi_j^R(\tau)\rangle. \quad (4.13)$$

Les coefficients b_j peuvent se décomposer en

$$b_j(\tau) = a_j(\tau) e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_j(u) du}. \quad (4.14)$$

Substituant (4.13) dans (4.12), les équations du mouvement pour les coefficients a_j s'écrivent

$$\frac{\partial}{\partial \tau} a_+(\tau) = \gamma(\tau) \exp\left(-\frac{i}{\epsilon} \delta(\tau)\right) a_-(\tau) \quad (4.15a)$$

$$, \frac{\partial}{\partial \tau} a_-(\tau) = -\gamma(\tau) \exp\left(\frac{i}{\epsilon} \delta(\tau)\right) a_+(\tau), \quad (4.15b)$$

1. On peut voir cette propriété en traçant les surfaces d'énergies dans l'espace des paramètres. On remarque alors qu'un transfert de population entre un état initial et un état cible est accompagné par un croisement des parties imaginaires des valeurs propres. (Voir la section 2 du chapitre 5 pour plus de détail.)

avec

$$\delta(\tau) = \int_{-\infty}^{\tau} [\lambda_{-}(u) - \lambda_{+}(u)] du = \int_{-\infty}^{\tau} -\sqrt{\rho(u)} du \quad (4.16)$$

et $\gamma(\tau)$ est le couplage non-adiabatique défini par

$$\pm\gamma(\tau) = \langle \varphi_{\mp}^{(L)} | \frac{\partial}{\partial \tau} | \varphi_{\pm}^R(\tau) \rangle. \quad (4.17)$$

4.1.3 Connexions initiales du système

Si nous choisissons initialement l'écart à la résonance $\Delta_{-} > 0$ et si nous supposons de plus que le système est initialement connecté à l'état fondamental $|0\rangle$, alors nous avons la connexion initiale² suivante: $|\phi(-\infty)\rangle = |0\rangle = -|\varphi_{-}^R(-\infty)\rangle$ ce qui correspond à $a_{-}(-\infty) = b_{-}(-\infty) = -1$ et $a_{+}(-\infty) = b_{+}(-\infty) = 0$. D'autres connexions peuvent être considérées. Nous résumons ci-dessous tout les cas possibles :

$$\Delta_{-} > 0 \quad \text{et} \quad |\phi(-\infty)\rangle = |0\rangle : |\phi(-\infty)\rangle = -|\varphi_{-}^R(-\infty)\rangle \quad (4.18a)$$

$$\Delta_{-} > 0 \quad \text{et} \quad |\phi(-\infty)\rangle = |1\rangle : |\phi(-\infty)\rangle = |\varphi_{+}^R(-\infty)\rangle \quad (4.18b)$$

$$\Delta_{-} < 0 \quad \text{et} \quad |\phi(-\infty)\rangle = |0\rangle : |\phi(-\infty)\rangle = |\varphi_{+}^R(-\infty)\rangle \quad (4.18c)$$

$$\Delta_{-} < 0 \quad \text{et} \quad |\phi(-\infty)\rangle = |1\rangle : |\phi(-\infty)\rangle = |\varphi_{-}^R(-\infty)\rangle. \quad (4.18d)$$

Toutefois, la connexion initiale de la fonction d'onde peut être sur l'état le moins dissipatif (*i.e.* le vecteur propre qui est associé à la valeur propre dont la partie imaginaire est la plus grande) ou l'état le plus dissipatif (*i.e.* le vecteur propre qui est associé à la valeur propre dont la partie imaginaire est la plus petite). En effet, la définition (4.10) montre qu'à $\tau \rightarrow -\infty$, $\text{sgn}(\Im[\sqrt{\rho}]) = \text{sgn}(-2\Delta_{-}\Gamma_{-}) = -\text{sgn}(\Delta_{-})$, ce qui implique que pour un écart à la résonance choisi initialement positif (*i.e.* $\Delta_{-} > 0$), alors la valeur propre λ_{-} est moins dissipative que λ_{+} . Si maintenant l'écart à la résonance est initialement négatif (*i.e.* $\Delta_{-} < 0$), alors la valeur propre λ_{+} est la moins dissipative. On en déduit donc les deux types de connexion suivantes :

- Si $|\phi(-\infty)\rangle = |0\rangle$: connexion à la valeur propre la moins dissipative
- Si $|\phi(-\infty)\rangle = |1\rangle$: connexion à la valeur propre la plus dissipative.

Considérant les deux connexions possibles (*i.e.* $|\varphi_{+}^R(-\infty)\rangle$ ou $|\varphi_{-}^R(-\infty)\rangle$), les probabilités de transition non-adiabatique notées respectivement $P_{+}(T)$ et $P_{-}(T)$ sont données par les expressions

$$\begin{aligned} P_{\pm}(T) &= \lim_{\tau \rightarrow +\infty} |\langle \varphi_{\pm}^{(L)}(\tau) | \phi(\tau) \rangle|^2 \\ &= |b_{\pm}(+\infty)|^2 \\ &= |a_{\pm}(+\infty)|^2 \exp \left(2T \Im \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_{\pm}(u) du \right] \right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Notre problème consiste alors à la détermination des coefficient $a_{\pm}(+\infty)$ dans la limite adiabatique caractérisée par $T \mapsto \infty$.

2. Ces connexions initiales se déduisent à partir des équations (3.24) et (3.25) du chapitre 3

4.2 Méthode des temps complexes

L'idée générale de la méthode du temps complexe consiste à prolonger le chemin de l'intégration de l'équation de Schrödinger le long d'un chemin se connectant à $\pm\infty$ sur l'axe réel et judicieusement choisi dans le plan complexe. Dans cette section, nous rappelons les principes de cette méthode et les conditions de validité développées dans les références [38, 39], puis nous allons décrire les conditions permettant la généralisation de la méthode à des systèmes dissipatifs à deux niveaux.

4.2.1 Définitions générales et hypothèses

La méthode est basée en général sur le prolongement analytique des vecteurs propres (4.7) et des valeurs propres (4.9) dans le plan complexe. Ces fonctions sont multivaluées et singulières aux points de dégénérescence complexes des valeurs propres qui coïcident avec les zéros du prolongement analytique $\rho(z)$ associé à la fonction $\rho(\tau)$. Nous notons par X l'ensemble des zéros de $\rho(z)$ qui se compose de $n+m$ points $z_{0,+}, z_{0,-}, \dots, z_{n-1,+}, z_{n-1,-}$ localisés dans le demi plan complexe supérieur (étiquetés avec $+$) et le demi plan complexe inférieur (étiquetés avec $-$) et nous supposons que chaque point est un zéro simple pour la fonction $\rho(z)$. Notons que pour les systèmes non dissipatifs (*i.e.* $\Gamma = 0$), les points vérifient $\bar{z}_{j,-} = z_{j,+}$. Dans ce genre du problème, les lignes de Stokes jouent un rôle capital car elles nous permettent de sélectionner les zéros qui auront la contribution dominante pour le calcul de la probabilité de transition non-adiabatique. Ces N points sélectionnés sont nommés *points de transition* et sont notés par z_0, \dots, z_{N-1} .

Les lignes de Stokes sont définies comme suit : soit $\delta_0(z)$ le prolongement analytique de la fonction $\delta_0(\tau)$ définie de la même manière que la fonction $\delta(\tau)$ (4.16) mais avec 0 comme borne inférieure de l'intégrale :

$$\delta(\tau) = \int_0^\tau [\lambda_-(u) - \lambda_+(u)] du = \int_0^\tau -\sqrt{\rho(u)} du. \quad (4.20)$$

La fonction (4.20) est multivaluée et les points de branchement coïcident avec ceux de l'ensemble X . Les lignes de niveau

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_j)] = \text{Const} \quad (4.21)$$

constituent l'ensemble des lignes de Stokes du problème³. Des exemples concrets de lignes de Stokes sont montrés dans les sections suivantes. Afin d'appliquer la méthode du temps complexe, nous considérons les hypothèses suivantes :

1. **Séparation suffisante du spectre**: il existe une constante positive k telle que pour chaque $\tau \in \mathbb{R}$, le spectre de $H(t)$ se compose de deux valeurs propres λ_+ et λ_- vérifiant $|\lambda_+ - \lambda_-| \geq k$.
2. **Analyticité**: l'Hamiltonien du système possède un prolongement analytique dans un domaine \mathcal{D} qui s'étend de l'axe réel et inclut la ligne de Stokes considérée.
3. **Comportement à l'infini**: les éléments de matrice $H_{ij}(z = \tau + is)$ de l'Hamiltonien H tendent rapidement vers deux constantes $H_{ij,\pm}$ indépendantes de s pour $\tau \rightarrow \pm\infty$.

3. voir l'annexe A du chapitre 1 où nous avons explicité un algorithme qui permet de calculer numériquement ces lignes de Stokes.

Ces hypothèses ont été rigoureusement formulées dans les références [38, 39] pour les systèmes non dissipatifs. En particulier, la dernière condition (*i.e.* hypothèse 3) assure d'une part qu'on peut trouver deux branches de la ligne de Stokes qui atteignent asymptotiquement à $\tau \rightarrow \pm\infty$ des valeurs imaginaires finies et peuvent être donc connectées à l'axe réel pour des temps infinis. D'autre part, le domaine \mathcal{D} peut être pris comme une bande de largeur constante. Nous verrons dans la section suivante que pour le cas des systèmes dissipatifs, les lignes de Stokes ne sont plus bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$ même sous la condition 3. Nous sommes donc obligés de déformer le contour d'intégration aux extrémités du domaine \mathcal{D} afin de le connecter à l'axe réel.

4.2.2 Comportement asymptotique des lignes de Stokes

Dans cette section, nous étudions le comportement asymptotique des lignes de Stokes. On suppose en particulier que la condition 3 est satisfaite, *i.e.* le prolongement analytique des éléments de matrice de l'Hamiltonien $\Omega(z = \tau + is)$, $\Delta(z = \tau + is)$ et $\Gamma(z = \tau + is)$ tendent suffisamment rapidement vers des limites finies $\Omega(\pm\infty) = \Omega_{\pm}$, $\Delta(\pm\infty) = \Delta_{\pm}$ et $\Gamma(\pm\infty) = \Gamma_{\pm} > 0$ pour $\tau \rightarrow \pm\infty$. Nous allons dans la suite déterminer les pentes de la ligne de Stokes à $\tau \rightarrow \pm\infty$.

Soit $z = \tau + i\gamma_{\pm}(\tau)$ un point de la ligne de Stokes tel que $|\tau| \gg 1$, alors d'après la définition (4.21), on peut écrire

$$0 = \Im \int_{z_j}^z \sqrt{\rho(u)} du \quad (4.22a)$$

$$\simeq (\gamma_{\pm}(\tau) + C_{\pm}) \Re[\sqrt{\rho(\pm\infty)}] + \tau \Im[\sqrt{\rho(\pm\infty)}], \quad (4.22b)$$

où C_{\pm} est une constante. Ce qui implique

$$\frac{\gamma_{\pm}(\tau) + C_{\pm}}{\tau} \simeq -\frac{\Im[\sqrt{\rho(\pm\infty)}]}{\Re[\sqrt{\rho(\pm\infty)}]} = \operatorname{sgn}(\Delta_{\pm}) \sqrt{\frac{-\alpha_{\pm} + \sqrt{\alpha_{\pm}^2 + \beta_{\pm}^2}}{\alpha_{\pm} + \sqrt{\alpha_{\pm}^2 + \beta_{\pm}^2}}} \quad (4.23)$$

Nous considérons dans la suite le cas physique où $\Omega_{\pm} = 0$ comme par exemple dans les modèles Allen-Eberly et Rosen-Zener pour lesquels on ajoute une dissipation. Dans ce cas les pentes de la ligne de Stokes s'écrivent pour $\tau \rightarrow \pm\infty$

$$\gamma_{\pm}(\tau) \simeq \tau \frac{\Gamma_{\pm}}{\Delta_{\pm}} - C_{\pm}. \quad (4.24)$$

L'équation (4.24) montre que lorsque $\Gamma_{\pm} \neq 0$, les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$. En particulier si nous considérons un passage adiabatique dans un modèle avec un croisement des parties imaginaires des valeurs propres, et qui correspond à un écart à la résonance qui change de signe au cours de la dynamique, alors les pentes de la ligne de Stokes à $\tau \rightarrow \pm\infty$ ont des signes opposés. En revanche, si nous considérons un passage adiabatique dans un modèle sans croisement des parties imaginaires des valeurs propres et qui correspond à un écart à la résonance constant à chaque instant, alors la pente de la ligne de Stokes garde le même signe tout au long de la dynamique. Notons que si le taux de la dissipation vérifie $\Gamma_{\pm} = 0$, alors les lignes de Stokes sont bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$.

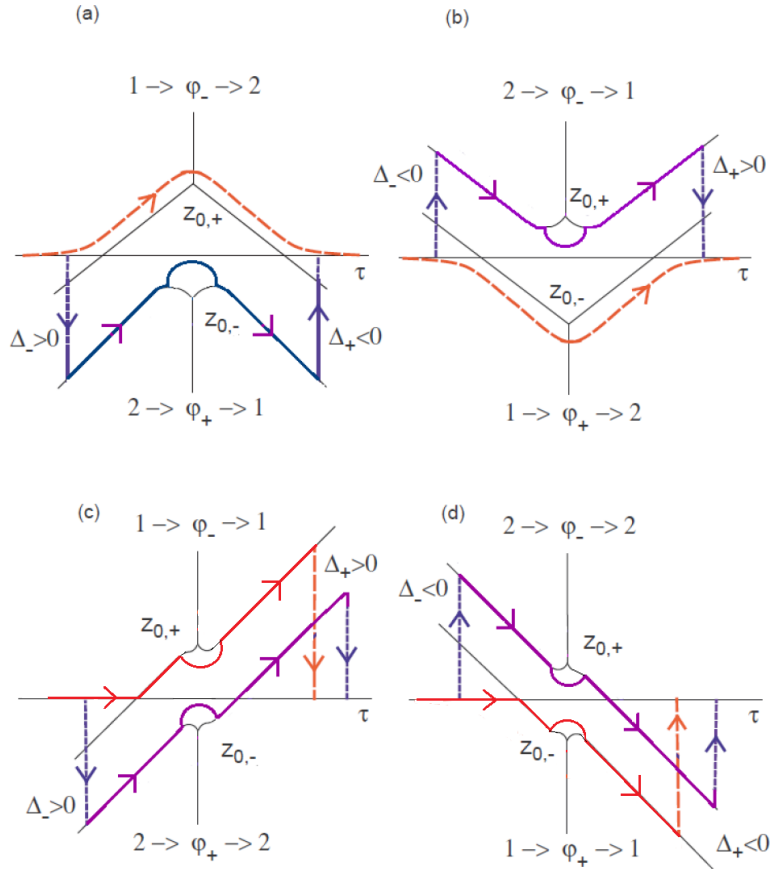


FIG. 4.1 – Différentes configurations possibles des lignes de Stokes (lignes noires) dans le plan complexe lorsque la dissipation est constante à chaque instant selon les signes de $\Delta(\pm\infty)=\Delta_{\pm}$ et avec $\Omega(\pm\infty) = 0$. Nous avons considéré ici la situation générique où les lignes de Stokes les plus proches de l'axe réel passent par un seul point de transition $z_{0,+}$ ou $z_{0,-}$ localisé respectivement dans le demi-plan complexe supérieur ou inférieur. La rangée supérieure (cas (a) et (b)) correspond à un modèle avec croisement des parties imaginaires des valeurs propres pour lequel l'écart à la résonance change de signe au cours de la dynamique. La rangée inférieure (cas (c) et (d)) correspond à un modèle sans croisement des parties imaginaires des valeurs propres pour lequel l'écart à la résonance garde un signe constant tout au long de la dynamique. Les cas (a) et (c) correspondent à la situation où le vecteur propre $|\varphi_- \rangle$ est initialement connecté à l'état le moins dissipatif $|1 \rangle$ et $|\varphi_+ \rangle$ est initialement connecté à l'état le plus dissipatif $|2 \rangle$. Les cas (b) et (d) correspondent à la situation opposée. Les chemins rouges correspondent aux chemins dissipatifs qu'on peut considérer lorsque le système est initialement connecté à l'état le moins dissipatif. Les lignes bleues correspondent aux chemins dissipatifs qu'il faut considérer lorsque le système est initialement connecté à l'état le plus dissipatif.

4.2.3 Cas générique - Connection à la valeur propre la moins dissipative

Le cas générique correspond à la situation où la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel passe par un seul point de transition z_0 . Si nous supposons de plus que le système est initialement connecté au vecteur propre le moins dissipatif, alors on peut étendre la technique développée dans la référence [39] à des systèmes dissipatifs. Cette situation correspond à l'un des quatre cas de la figure 4.1 pour lequel, le point de transition z_0 est délimité par la ligne rouge et l'axe réel. Cette ligne indique le chemin dissipatif dans le plan complexe qu'on peut utiliser afin d'intégrer l'équation de Schrödinger. La notion d'un chemin dissipatif ainsi que ces propriétés sont étudiées en détail dans la section 4.2.4. Dans ce paragraphe, nous nous concentrons plus spécifiquement sur la connection initiale de l'état $|\phi(-\infty)\rangle$ au vecteur propre $|\varphi_-(-\infty)\rangle$ et on considère en particulier le modèle avec croisement des parties imaginaires des valeurs propres. Cette situation correspond au cas (a) de la figure 4.1 pour lequel le chemin dissipatif passe au-dessus du point de transition $z_{0,+}$ localisé dans le demi-plan supérieur. Les autres cas avec une connection initiale au vecteur propre le moins dissipatif, correspondent aux chemins dissipatifs (*i.e.* les lignes rouges) des cas (b) et (d) passant au-dessous du point de transition $z_{0,-}$ localisé dans le demi-plan inférieur et le cas (c) pour lequel le chemin dissipatif passe au-dessus du point de transition $z_{0,+}$.

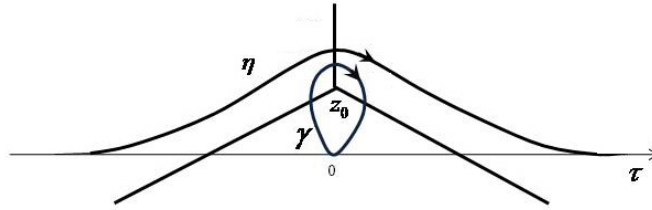


FIG. 4.2 – La boucle γ et le chemin dissipatif qui passe au dessus du point de transition.

Intégration le long d'une boucle entourant le point de transition

Dans ce paragraphe, nous établissons quelques formules générales [98] qui nous permettent dans la suite de calculer la probabilité de transition non adiabatique. Soient γ_1 et γ_2 deux chemins qui relient le point $z = 0$ à un point z dans le plan complexe tel que $\gamma_1^{-1}\gamma_2 \equiv \gamma$ forme une simple boucle basée à l'origine et entourant le point de transition z_0 (voir figure 4.2). On introduit l'opérateur de transport parallèle $W(z,0)$ [98] vérifiant

$$|\varphi_k(z)\rangle = W(z,0)|\varphi_k(0)\rangle, \quad W(0,0) = \mathbb{1}_2. \quad (4.25)$$

Si nous notons respectivement par $W(z|\gamma_1)$ et $W(z|\gamma_2)$ les valeurs que prend l'opérateur W au point z par prolongement analytique le long des chemins γ_1 et γ_2 , alors nous avons

$$W(z|\gamma_2) = W^{-1}(z|\gamma_1)W(z|\gamma_1)W(z|\gamma_2) \quad (4.26a)$$

$$= W(z|\gamma_1)W(z|\gamma_1^{-1}\gamma_2) \quad (4.26b)$$

$$= W(z|\gamma_1)W(z|\gamma). \quad (4.26c)$$

Nous notons maintenant respectivement par $W(0|\gamma)|\varphi_{\pm}(0)\rangle$ et $\lambda_{\pm}(0|\gamma)$ les vecteurs et les valeurs propres obtenus au point $z = 0$ après avoir effectué une révolution le long du contour fermé γ . Comme z_0 est un point de branchement pour la fonction $\rho(z)$ et comme γ est une

simple boucle fermée qui entoure ce point, la racine carrée dans l'équation (4.9) change de signe de telle sorte que les valeurs propres changent leurs étiquettes à la fin de la boucle. Ainsi on a

$$H(0)W(0|\gamma)|\varphi_+(0)\rangle = \lambda_+(0|\gamma)W(0|\gamma)|\varphi_+(0)\rangle \quad (4.27)$$

$$= \lambda_-W(0|\gamma)|\varphi_+(0)\rangle \quad (4.28)$$

et

$$H(0)W(0|\gamma)|\varphi_-(0)\rangle = \lambda_-(0|\gamma)W(0|\gamma)|\varphi_-(0)\rangle \quad (4.29)$$

$$= \lambda_+W(0|\gamma)|\varphi_-(0)\rangle. \quad (4.30)$$

Nous exprimons la proportionnalité résultante entre $W(0|\gamma)|\varphi_j(0)\rangle$ et $|\varphi_k(0)\rangle$, $k \neq j$, par une phase $\theta_j(0|\gamma)$ définie comme suit:

$$W(0|\gamma)|\varphi_j(0)\rangle = e^{-i\theta_j(0|\gamma)}|\varphi_k(0)\rangle, \quad k \neq j. \quad (4.31)$$

Si on note maintenant par $|\varphi_k(z|\gamma_2)\rangle = W(z|\gamma_2)|\varphi_k(0)\rangle$, le vecteur obtenu au point z par prolongement analytique du vecteur $|\varphi_k(0)\rangle$ le long du chemin γ_2 , alors en tenant compte des résultats (4.26c) et (4.31), nous obtenons les identités suivantes

$$|\varphi_k(z|\gamma_2)\rangle = W(z|\gamma_2)|\varphi_k(0)\rangle \quad (4.32a)$$

$$= W(z|\gamma_1)W(0|\gamma)|\varphi_k(0)\rangle \quad (4.32b)$$

$$= W(z|\gamma_2)e^{-i\theta_k(0|\gamma)}|\varphi_j(0)\rangle \quad (4.32c)$$

$$= |\varphi_j(z|\gamma_1)\rangle e^{-i\theta_k(0|\gamma)}, \quad k \neq j. \quad (4.32d)$$

Considérons maintenant le prolongement analytique de la fonction d'onde $|\phi(\tau)\rangle$ dans le domaine \mathcal{D} :

$$|\phi(z)\rangle = \sum_{j=\pm} c_j(z) e^{-iT \int_0^z \lambda_j(u) du} |\varphi_j(z)\rangle, \quad (4.33)$$

soit

$$\frac{d}{dz} c_-(z) = -\gamma(z) e^{iT\delta_0(z)} c_+(z), \quad (4.34a)$$

$$\frac{d}{dz} c_+(z) = \gamma(z) e^{-iT\delta_0(z)} c_-(z). \quad (4.34b)$$

Les équations (4.34) peuvent être écrites sous la forme

$$c_-(z) = c_-(-\infty) - \int_{-\infty}^z \gamma(z') e^{+iT\delta_0(z')} c_+(z') dz', \quad (4.35a)$$

$$c_+(z) = c_+(-\infty) + \int_{-\infty}^z \gamma(z') e^{-iT\delta_0(z')} c_-(z') dz'. \quad (4.35b)$$

Dans la suite, on définit le domaine $\mathcal{U} \subset \mathcal{D}$ en enlevant juste la branche de coupure issue du point z_0 (voir figure 4.2). Ceci nous permet de travailler avec seulement des fonctions univaluées. La méthode consiste maintenant à contrôler la solution (4.33) le long d'un chemin η passant au-dessus du point de branchement z_0 . Le seul problème est que comme η n'appartient

pas au domaine \mathcal{U} , nous ne pouvons pas utiliser la décomposition (4.33) tout le long le chemin η . Mais on peut l'utiliser pour $\tau \gg 1$

$$|\phi(z)\rangle = \sum_{j=\pm} \tilde{c}_j(z) e^{-iT \int_0^z \tilde{\lambda}_j(u) du} |\tilde{\varphi}_j(z)\rangle, \quad \Re(z) \gg 1, \quad (4.36)$$

où \tilde{f} signifie qu'on a effectué un prolongement analytique le long du chemin η . En tenant compte du résultat (4.32d), on peut voir que

$$|\tilde{\varphi}_{\pm}(z)\rangle = e^{-i\theta_{\pm}(0|\gamma)} |\varphi_{\mp}(z)\rangle. \quad (4.37)$$

En comparant maintenant les équations (4.33) et (4.36), nous obtenons

$$|\phi(z)\rangle = c_+(z) e^{-iT \int_0^z \lambda_+(u) du} |\varphi_+(z)\rangle + c_-(z) e^{-iT \int_0^z \lambda_-(u) du} |\varphi_-(z)\rangle \quad (4.38a)$$

$$= \tilde{c}_-(z) e^{-iT \int_0^z \tilde{\lambda}_-(u) du} e^{-i\theta_-(0|\gamma)} |\varphi_+(z)\rangle + \tilde{c}_+(z) e^{-iT \int_0^z \tilde{\lambda}_+(u) du} e^{-i\theta_+(0|\gamma)} |\varphi_-(z)\rangle, \quad (4.38b)$$

soit

$$c_+(z) = \tilde{c}_-(z) e^{-iT \int_0^z [\tilde{\lambda}_-(u) - \lambda_+(u)] du} e^{-i\theta_-(0|\gamma)}, \quad (4.39a)$$

$$c_-(z) = \tilde{c}_+(z) e^{-iT \int_0^z [\tilde{\lambda}_+(u) - \lambda_-(u)] du} e^{-i\theta_+(0|\gamma)}. \quad (4.39b)$$

Comme le chemin γ_2 passe au-dessus du point de transition (*i.e.* il traverse la branche de coupure) et le chemin γ_1 passe au-dessous, on peut écrire $\int_{\gamma_2} \lambda_{\pm}(u) du = \oint_{\gamma} \lambda_{\pm}(u) du + \int_{\gamma_1} \lambda_{\mp}(u) du$ et $\int_0^z \lambda_{\pm}(u) du = \int_{\gamma_1} \lambda_{\pm}(u) du$, soit

$$\int_0^z [\tilde{\lambda}_{\pm}(u) - \lambda_{\mp}(u)] du = \oint_{\gamma} \lambda_{\pm}(u) du = \mp \delta_0(z_0). \quad (4.40)$$

ce qui donne

$$c_+(z) = \tilde{c}_-(z) e^{-iT \delta_0(z_0)} e^{-i\theta_-(0|\gamma)}, \quad (4.41a)$$

$$c_-(z) = \tilde{c}_+(z) e^{+iT \delta_0(z_0)} e^{-i\theta_+(0|\gamma)}. \quad (4.41b)$$

La relation (4.41a) montre que si nous contrôlons le coefficient $\tilde{c}_-(z)$ le long du chemin dissipatif η , alors nous gagnons de l'information sur le coefficient $c_+(z)$ et donc sur la probabilité de transition non adiabatique et réciproquement pour la relation (4.41b).

Le théorème de Born et Fock dans le plan complexe

Dans une deuxième étape, nous évaluons les coefficients $\tilde{c}_-(z)$ et $\tilde{c}_+(z)$ dans la limite adiabatique. Nous considérons ici la condition initiale $b_-(-\infty) = -1$, ce qui correspond à $c_-(-\infty) = -e^{-iT \int_{-\infty}^0 \lambda_-(u) du}$. La méthode consiste plus précisément à contrôler les équations différentielles (4.35) le long d'un chemin *dissipatif* η paramétrisé par $z = \eta(s)$, $s \in \mathbb{R}$. Nous utilisons dans la suite les notations $\tilde{c}_{\pm}(s)$, $\tilde{\gamma}(s)$, et $\tilde{\delta}_0(s)$ pour respectivement $\tilde{c}_{\pm}(\eta(s))$, $\tilde{\gamma}(\eta(s))$ et $\tilde{\delta}_0(\eta(s))$. Un chemin dissipatif est défini comme l'ensemble des points z tels que $\Im[\delta_0(\eta(s))]$

est une fonction non décroissante⁴ pour tout $s \in \mathbb{R}$. D'une part, l'équation (4.35b) donne

$$|\tilde{c}_+(s)| \leq \int_{-\infty}^s |\dot{\eta}(u)| |\tilde{\gamma}(u)| |\tilde{c}_-(u)| e^{T \operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(u)} du \quad (4.42a)$$

$$\begin{aligned} &\leq e^{T \operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(s)} \int_{-\infty}^s |\dot{\eta}(u)| |\tilde{\gamma}(u)| |\tilde{c}_-(u)| e^{T [\operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(u) - \operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(s)]} du \\ &\leq e^{T \operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(s)} \int_{-\infty}^s |\dot{\eta}(u)| |\tilde{\gamma}(u)| |\tilde{c}_-(u)| du \end{aligned} \quad (4.42b)$$

$$\leq e^{T \operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(s)} \|\tilde{c}_-\| \int_{-\infty}^{+\infty} |\dot{\eta}(u)| |\tilde{\gamma}(u)| du \quad (4.42c)$$

$$\leq k e^{T \operatorname{Im} \tilde{\delta}_0(s)} \|\tilde{c}_-\| \quad (4.42d)$$

où $\|\tilde{c}_-\| = \sup_{s \in \mathbb{R}} |\tilde{c}_-(\eta(s))|$ et k est constante positive. Notons que nous avons utilisé la propriété que le chemin η est dissipatif et la condition (3) qui assure $\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\gamma}(u)| du < \infty$. D'une autre part, une intégration par partie dans l'équation (4.35a) donne

$$\tilde{c}_-(s) = c_-(-\infty) - \left\{ \left[i \epsilon \dot{\eta}(u) \frac{\tilde{\gamma}(u)}{\sqrt{\tilde{\rho}(u)}} e^{i T \tilde{\delta}_0(u)} \tilde{c}_+(u) \right]_{-\infty}^s \right. \quad (4.43a)$$

$$\left. - i \epsilon \int_{-\infty}^s \dot{\eta}(u) \left(\frac{\tilde{\gamma} \tilde{c}_+}{\sqrt{\tilde{\rho}}} \right)' (u) e^{i T \tilde{\delta}_0(u)} du \right\}, \quad (4.43b)$$

$$\begin{aligned} &= c_-(-\infty) - i \epsilon \dot{\eta}(s) \frac{\tilde{\gamma}(s)}{\sqrt{\tilde{\rho}(s)}} e^{i T \tilde{\delta}_0(s)} \tilde{c}_+(s) \\ &\quad - i \epsilon \int_{-\infty}^s \dot{\eta}(u) \left[\left(\frac{\tilde{\gamma}}{\sqrt{\tilde{\rho}}} \right)' (u) \tilde{c}_+(u) e^{i T \tilde{\delta}_0(u)} + \frac{\tilde{\gamma}^2}{\sqrt{\tilde{\rho}}} \tilde{c}_-(u) \right] du. \end{aligned} \quad (4.43c)$$

En insérant maintenant le résultat (4.42e) dans (4.43b), nous obtenons

$$\begin{aligned} |\tilde{c}_-(s)| &\leq |c_-(-\infty)| + k \epsilon \|\tilde{c}_-\| |\dot{\eta}(s)| \left| \frac{\tilde{\gamma}(s)}{\sqrt{\tilde{\rho}(s)}} \right| + k \epsilon \|\tilde{c}_-\| \int_{-\infty}^{+\infty} |\dot{\eta}(u)| \left| \left(\frac{\tilde{\gamma}}{\sqrt{\tilde{\rho}}} \right)' (u) \right| du \\ &\quad + \epsilon \|\tilde{c}_-\| \int_{-\infty}^{+\infty} |\dot{\eta}(u)| \left| \frac{\tilde{\gamma}^2}{\sqrt{\tilde{\rho}}} \right| du, \end{aligned} \quad (4.44)$$

soit

$$|\tilde{c}_-(s)| \leq |c_-(-\infty)| + \epsilon k \|c_-\|, \quad (4.45)$$

où k est une autre constante, soit

$$\|\tilde{c}_-\| \leq |c_-(-\infty)| \frac{1}{1 - k \epsilon}. \quad (4.46)$$

On conclut alors que dans la limite adiabatique (*i.e.* $\epsilon \rightarrow 0$)

$$\tilde{c}_-(z) = c_-(-\infty) [1 + O(\epsilon)]. \quad (4.47)$$

4. Cette définition correspond à la condition initiale $b_-(-\infty) = -1$. Si nous considérons la condition initiale $b_+(-\infty) = 1$, alors le chemin dissipatif sera défini comme l'ensemble des points z tels que $-\Im[\delta_0(\eta(s))]$ est une fonction non décroissante pour tout $s \in \mathbb{R}$. voir la section 4.2.4 pour plus de détail.

La dernière équation est l'extension du théorème de Born et Fock dans le plan complexe. *Le choix du point de transition est dicté par la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel.* Une étude plus détaillée sur les chemins dissipatifs est présentée dans la section 4.2.4. Nous montrerons en particulier que la ligne en tirets rouge de la figure 4.1a correspond bien à un chemin dissipatif.

Résultats

Tenant compte des résultats (4.41a) et (4.47), nous obtenons

$$c_+(z) = -e^{-iT\delta_0(z_0)} e^{-i\theta_-(0|\gamma)} e^{-iT \int_{-\infty}^0 \lambda_-(u) du} [1 + O(\epsilon)]. \quad (4.48)$$

En faisant tendre z vers l'infini, nous concluons

$$b_+(\infty) = -e^{-iT\delta_0(z_0)} e^{-i\theta_-(0|\gamma)} e^{-iT[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(u) du + \int_0^{+\infty} \lambda_+(u) du]} [1 + O(\epsilon)]. \quad (4.49)$$

Considérant maintenant les différentes conditions initiales décrites dans la figure 4.1 et la transformation (4.5) les probabilités de transition non adiabatiques s'écrivent

$$P_{\pm}(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{\pm 2T \Im[\delta_0(z_0, \pm)]} e^{2T \Im[\int_{-\infty}^0 \lambda_{\mp}(u) du + \int_0^{+\infty} \lambda_{\pm}(u) du]} e^{2T \Im[\theta_{\mp}(0|\gamma)]}. \quad (4.50)$$

La formule (4.50) est donc la généralisation de la formule DDP à des systèmes dissipatifs. Cependant, la preuve complète de ce résultat nécessite l'existence d'un chemin dissipatif qui se connecte à l'axe réel à $\pm\infty$ afin d'assurer la validité du résultat (4.47). Cette dernière condition est non triviale quand les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\pm\infty$. Nous allons montrer dans la suite, que cette condition est en particulier satisfaite lorsque le système est initialement connecté à l'état le moins dissipatif. Dans la situation opposée (*i.e.* connection à l'état le plus dissipatif), nous montrerons que la formule restera valable, mais la technique utilisée pour la prouver est différente et conduit à une condition supplémentaire. Ceci est étudié dans la section 4.2.5.

4.2.4 Chemin dissipatif

La validité de la technique précédente nécessite de trouver un chemin dissipatif reliant $\tau \rightarrow -\infty$ à $\tau \rightarrow +\infty$ et qui passe au-dessus du point de transition si ce dernier est localisé dans le plan complexe supérieur ou au dessous du point de transition s'il est localisé dans le plan complexe inférieur.

Définition

Si nous paramétrisons le chemin η par $\eta(s)$ avec $s \in \mathbb{R}$ et si nous considérons la connection initiale du système à $|\varphi_-(-\infty)\rangle$, alors la condition pour que η soit dissipatif est donnée par

$$\frac{d}{ds} \Im[\delta_0(\eta(s))] = -\Im \left[\dot{\eta}(s) \sqrt{\rho(\eta(s))} \right] \geq 0. \quad (4.51)$$

Dans le cas où le système est initialement connecté à $|\varphi_+(-\infty)\rangle$, la condition est donnée par

$$\frac{d}{ds} \Im[-\delta_0(\eta(s))] = \Im \left[\dot{\eta}(s) \sqrt{\rho(\eta(s))} \right] \geq 0. \quad (4.52)$$

Notons que les lignes de Stokes desquelles les points de transition sont exclus sont aussi des chemins dissipatifs car $\frac{d}{ds} \Im[\delta_0(\eta(s))] = 0$ le long de ces lignes.

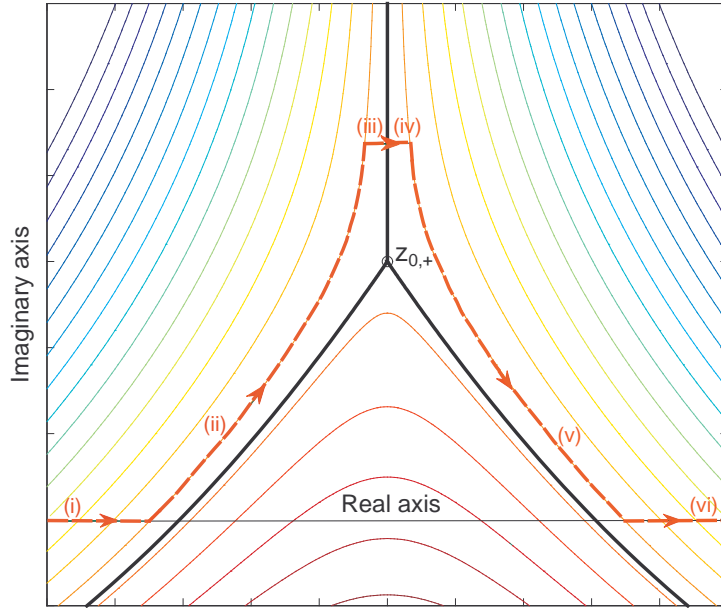


FIG. 4.3 – Les lignes de niveau $\Im[\delta_0(z)] = \text{const}$ au voisinage du point de transition z_0 . Les flèches indiquent le chemin dissipatif qu'on peut utiliser dans ce cas pour caculer la probabilité de transition non adiabatique.

Cas des lignes de Stokes bornées à l'infini

Quand les lignes de Stokes sont bornées à $\pm\infty$, comme dans le cas d'une dissipation dépendante du temps (*i.e.* $\Gamma_{\pm} = 0$) (ou dans le cas des systèmes non dissipatifs), l'analyse de la référence [39] montre qu'on peut trouver un chemin dissipatif passant au delà du point de transition. En particulier, la condition (3) assure que

$$\lim_{\tau \rightarrow \pm\infty} c_k(\tau + is) = c_k(\pm\infty), \quad k = -, +, \quad (4.53)$$

ce qui nous permet de connecter initialement les coefficients c_k au chemin dissipatif. La formule (4.50) est donc complètement justifiée lorsque les lignes de Stokes sont bornées à $\pm\infty$.

Cas où les lignes de Stokes ne sont pas bornées à l'infini

Quand les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\pm\infty$, les lignes rouges de la figure 4.1 sont conçus en général pour être des chemins dissipatifs qui connectent l'axe réel à $\tau \rightarrow \pm\infty$ comme indiqué ci-dessous.

Connection au vecteur propre le moins dissipatif: cas d'un modèle avec croisement des parties imaginaires des valeurs propres. Dans ce paragraphe nous montrons que le chemin rouge de la figure 4.1a est dissipatif. Le cas 4.1b sera traité d'une façon similaire. Nous décomposons tout d'abord le chemin η en des segments paramétrisés comme suit : (i) $\eta(s) = s$ (sur l'axe réel) pour s allant de $-\infty$ jusqu'à atteindre la première ligne de niveau

$\Im[\delta_0(z)] = \text{const}$ localisée au niveau de la branche gauche de la ligne de Stokes; (ii) nous suivons cette ligne qui en général quasi-parallèle à la branche de la ligne de Stokes; (iii) nous quittons horizontalement la ligne de niveau au-dessus du point de transition $z_{0,+}$ (i.e. comme $\eta(s) = s + i\alpha$, $\alpha > \Im[z_{0,+}]$) afin d'atteindre la branche de coupure (la ligne verticale issue du point $z_{0,+}$) et nous suivons cette ligne horizontale jusqu'à atteindre la première ligne de niveau localisée au niveau de la branche droite de la ligne de Stokes $\Im[\delta_0(z)] = \text{const}$; (iv) nous suivons parallèlement cette ligne de niveau jusqu'à atteindre l'axe réel; et finalement (v) $\eta(s) = s$ (sur l'axe réel) pour s allant de cette ligne de niveau jusqu'à $+\infty$.

Le segment (i) du chemin η , paramétrisé par $\eta(s) = s$, est dissipatif car $\text{sgn}\{-\Im[\dot{\eta}(s)\sqrt{\rho(\eta(s))}]\} = \text{sgn}[2\Delta(s)\Gamma] = \text{sgn}[\Delta(s)]$ (voir l'équation (4.10)), ce qui est positif pour un écart à la résonance initial positif comme le montre le cas (a) de la figure 4.1. Le segment (v) est aussi un chemin dissipatif car $\text{sgn}[-\Im[\sqrt{\rho(\eta(s))}]] = -\text{sgn}[\Delta(s)]$, qui est encore positif. Notons que le changement de signe qui apparaît dans le calcul précédent est dû principalement au changement de signe de la partie imaginaire de $\sqrt{\rho(\eta(s))}$ quand la dynamique passe sur le second feuillet de Riemann en traversant la branche de coupure. Nous remarquons que ce changement de signe ne se produit pas si le chemin η passe au-dessous du point $z_{0,+}$, (comme c'est le cas si nous limitons le calcul sur l'axe réel). Les segments (ii) et (iv) sont aussi des chemins dissipatifs car le long d'une ligne de niveau nous avons $\frac{d}{ds}\Im[\sqrt{\rho(\eta(s))}] = 0$. Pour les mêmes raisons que les segments (i) et (vi), le chemin (iii) est dissipatif. Il résulte alors que tout le chemin η est dissipatif. La formule (4.50) est donc complètement justifiée si un tel chemin existe.

Connection au vecteur propre le moins dissipatif : cas d'un modèle sans croisement des parties imaginaires des valeurs propres Considérons le chemin rouge de la figure 4.1c qui correspond au cas lorsque le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_-\rangle$ (i.e. $\Delta_- > 0$). Nous décomposons tout d'abord le chemin en des segments paramétrisés comme suit : (i) $\eta(s) = s$ (sur l'axe réel) pour s allant de $-\infty$ jusqu'à atteindre la première branche de la ligne de Stokes définie comme $\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_{0,+})]$; (ii) nous suivons cette ligne de niveau jusqu'à atteindre le voisinage du point de transition $z_{0,+}$; (iii) nous quittons cette ligne afin d'éviter le point de transition; (iv) nous rejoignons la ligne de Stokes et nous la suivons jusqu'à atteindre l'extrémité de la ligne verticale descendante; (v) on se connecte verticalement à l'axe réel pour $\tau \rightarrow +\infty$. Nous pouvons tout d'abord utiliser le même argument développé ci-dessus pour montrer que le segment (i) est dissipatif. Les étapes (ii) et (iv) sont bien dissipatifs car la ligne de Stokes est par définition est dissipatif. L'étape (iii) est traitée en détail dans la section (4.2.6) puisqu'elle est similaire au cas non générique qui correspond à la situation où la ligne de Stokes passe par plusieurs points de transition. Il reste à montrer que la ligne verticale (tirets rouges) qui relie le chemin à l'axe réel à $\tau \rightarrow +\infty$ est dissipative. En paramétrisant ce segment par $\eta(s) = \tau_+ + i(\alpha_+ - s)$ avec $\tau_+, \alpha_+ \rightarrow +\infty$ et $s \in [0, \alpha_+]$, il est alors facile de voir que $\text{sgn}\{-\Im[\dot{\eta}(s)\sqrt{\rho(\eta(s))}]\} = \text{sgn}\{\text{Re}\sqrt{\rho(\eta(s))}\} \geq 0$. Ce résultat montre alors que cette ligne verticale est dissipative. La même stratégie peut être utilisée pour montrer que le chemin rouge de la figure 4.1d est aussi dissipatif (i.e. correspond à une connection initiale au vecteur propre le moins dissipatif $|\varphi_+\rangle = |1\rangle$).

4.2.5 Cas générique avec connexion au vecteur propre le plus dissipatif

Les cas où les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$ et le système est initialement connecté au vecteur propre le plus dissipatif sont illustrés par les courbes bleues de la figure 4.1. En particulier, les lignes verticales bleues en pointillées situées à gauche (respectivement à droite) des figure 4.1a et 4.1b sont anti-dissipatives (respectivement dissipatives). Cela signifie que nous ne pouvons plus trouver un chemin qui est globalement dissipatif qui connecte l'axe réel à $\tau \rightarrow \pm\infty$. Une façon simple d'utiliser un chemin partiellement dissipatif, consiste à prendre la ligne de Stokes elle-même dont nous excluons le point de transition comme le montre la figure 4.1 (voir la référence [38] pour une technique alternative). La stratégie consiste donc à (i) connecter la ligne de Stokes à l'axe réel à $\tau \rightarrow -\infty$, (ii) nous suivons cette ligne de Stokes jusqu'à atteindre le voisinage du point de transition où nous sommes obligés à déformer le contour d'intégration vu que les équations différentielles (4.35) sont singulières en ce point. Nous rejoignons dans la suite la ligne de Stokes et nous continuons de la suivre pour finalement (iii) se connecter à l'axe réel à $\tau \rightarrow +\infty$.

Toutefois, nous avons remarqué que le choix de la ligne de Stokes dans ce cas, doit être fait de telle sorte que la formule (4.50) donne une valeur finie. Par exemple, dans la situation du cas (a) de la figure 4.1, nous ne pouvons pas choisir la ligne de Stokes qui passe par le point $z_{0,+}$, autrement la formule (4.50) diverge dans la limite adiabatique. Ainsi, la ligne de Stokes qui doit être considérée est celle juste en dessous, passant par le point de transition $z_{0,-}$.

L'étape (ii) est traitée en détail dans la section suivante puisqu'elle est similaire au cas non générique qui correspond à la situation où la ligne de Stokes passe par plusieurs points de transition. Les étapes (i) et (iii), quand la ligne verticale qui joint la ligne de Stokes à l'axe réel est anti-dissipatif, exigent un traitement spécifique. Nous traitons en particulier les cas (b) et (d) de la figure 4.1 (qui correspondent à une connection initiale à l'état $|\varphi_{-}\rangle$). Nous paramétrisons tout d'abord le chemin vertical par $\eta(s) = \tau_{-} + is$ avec $\tau_{-} \rightarrow -\infty$. Tenant compte de l'équation (4.35b), on peut écrire le long de ce chemin

$$|\tilde{c}_{+}(s)| \leq \int_0^s |\tilde{\gamma}(\tau_{-} + iu)| |\tilde{c}_{-}(\tau_{-} + iu)| e^{T \text{Im} \tilde{\delta}_0(\tau_{-} + iu)} du \quad (4.54)$$

La condition (iii) et l'usage du fait $\Omega_{\pm} = 0$, nous permettent d'écrire

$$\text{Im} \tilde{\delta}_0(\tau_{-} + iu) = -\text{Im} \int_0^{\tau_{-} + iu} \sqrt{\rho(z)} dz \quad (4.55a)$$

$$\begin{aligned} &= \text{Im} \int_0^{-\tau_{-}} \sqrt{\rho(-s)} ds \\ &\quad - \text{Im} i \int_0^u \sqrt{\rho(\tau_{-} + is)} ds \end{aligned} \quad (4.55b)$$

$$= \text{sgn}(\Delta_{-}) \Gamma_{-} \tau_{-} - |\Delta_{-}| u \quad (4.55c)$$

$$= -\Gamma_{-} \tau_{-} - |\Delta_{-}| u, \quad (4.55d)$$

En inserant ce dernier résultat dans (4.54), on obtient

$$|\tilde{c}_{+}(s)| \leq e^{-T \Gamma_{-} \tau_{-}} \int_0^s |\tilde{\gamma}(\tau_{-} + iu)| |\tilde{c}_{-}(\tau_{-} + iu)| du \quad (4.56a)$$

$$\leq e^{-T \Gamma_{-} \tau_{-}} \|\tilde{c}_{-}\| |\tilde{\gamma}_{-}| s, \quad (4.56b)$$

où nous avons utilisé la notation $\tilde{\gamma}_{-} \equiv \tilde{\gamma}(\tau_{-})$. Insérant maintenant ce dernier résultat dans l'équation (4.35a) (après avoir effectué une intégration par parties dans (4.35a)), on obtient

$$\begin{aligned}
 |\tilde{c}_-(s)| &\leq |c_-(-\infty)| + \epsilon \|\tilde{c}_-\| \left| \frac{\tilde{\gamma}_-^2}{\sqrt{\tilde{\rho}_-}} \right| e^{T|\Delta_-|s} \\
 &+ \epsilon \|\tilde{c}_-\| \|\tilde{\gamma}_-\| \left| \left(\frac{\tilde{\gamma}_-}{\sqrt{\tilde{\rho}_-}} \right)'(\tau_-) \right| \int_0^s e^{T|\Delta_-|u} u du + \epsilon \|\tilde{c}_-\| \left| \frac{\tilde{\gamma}_-^2}{\sqrt{\tilde{\rho}_-}} \right| s
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

avec $0 \leq s \leq \tau_- \Gamma_- / \Delta_-$. L'équation (4.57) montre alors que la connexion de la ligne de Stokes à l'axe réel (*i.e.* $c_-(\tau_- + i\tau_- \Gamma_- / \Delta_-) = c_-(-\infty)$) est obtenue quand

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} \gamma^2(\tau + i\tau \Gamma_- / \Delta_-) e^{T\Gamma_- |\tau|} \tau = 0. \tag{4.58}$$

La même condition est appliquée pour reconnecter la ligne de Stokes à l'axe réel à $\tau \rightarrow +\infty$ quand la ligne verticale est anti-dissipative:

$$\lim_{\tau \rightarrow +\infty} \gamma^2(\tau + i\tau \Gamma_+ / \Delta_+) e^{T\Gamma_+ |\tau|} \tau = 0. \tag{4.59}$$

Ces conditions (4.58) et (4.59) sont vérifiés en particulier pour une impulsion gaussienne. Pour des impulsions de la forme sécante hyperbolique, ces conditions (4.58) et (4.59) restreignent les valeurs de Γ_{\pm} à $T\Gamma_{\pm} < 2$.

4.2.6 Cas non générique

Le cas non générique correspond à la situation où la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel passe par plusieurs points de transition. L'analyse précédente montre que dans une telle situation, nous ne pouvons plus trouver un chemin dissipatif global passant au-dessus de tous les points de transition. La stratégie qui est alors adoptée afin de calculer la probabilité de transition non adiabatique est d'intégrer l'équation de Schrödinger directement sur les différentes branches de la ligne de Stokes. On suppose ici que le problème de la connexion à l'axe réel à l'infini est satisfait, autrement dit les conditions (4.58) et (4.59) sont satisfaites dans le cas d'une connexion initiale à la valeur propre la plus dissipative. Dans cette section nous traitons l'intégration de l'équation de Schrödinger localement autour des points de transition. Cependant, le problème est que, vu que les équations différentielles (4.15) sont singulières aux niveaux des points de transition $z_k, k = 0, 1, \dots, N-1$, nous sommes forcés de déformer le contour d'intégration au voisinage de chaque point (voir la figure 4.4). Cette situation non-générique apparaît souvent dans les applications. Notons que pour les cas des systèmes non dissipatifs, la fonction ρ définie par l'équation (4.9) vérifie $\rho(-z) = \rho(z)$ et par conséquent, les lignes de Stokes dans le plan complexe sont symétriques par rapport aux axes réel et imaginaire. En particulier, si nous supposons que la fonction ρ possède deux points de transition localisés dans le demi-plan complexe supérieur et qui sont symétriques par rapport à l'axe imaginaire, alors la ligne de Stokes traverse l'axe imaginaire et connecte ces deux points. Nous montrerons dans la suite, que la probabilité de transition non adiabatique dans cette situation n'est plus donnée par une fonction qui décroît exponentiellement en fonction de T mais par une fonction qui oscille en fonction de T due à l'interférence des différentes contributions des points de transition.

Dans la suite, nous considérons des points de transition situés dans le plan complexe supérieur (voir figure 4.4). La figure 4.4 montre le chemin d'intégration utilisé pour calculer la probabilité de transition non adiabatique dans le cas où $N = 2$. La stratégie consiste alors à contrôler la

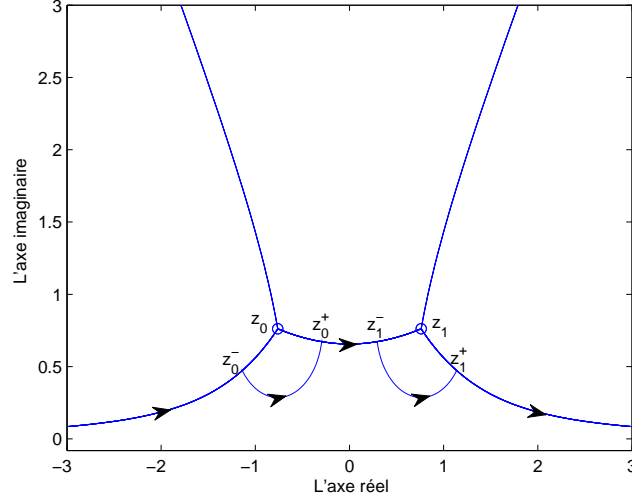


FIG. 4.4 – Le chemin d'intégration dans le plan complexe utilisé pour calculer la probabilité de transition non-adiabatique dans le cas où $N=2$.

solution de (4.15) de $-\infty$ à un point z_0^- localisé au voisinage du point de transition z_0 le long de la ligne de Stokes. Puis nous déformons le contour de l'intégration pour aller de z_0^- à z_0^+ localisé à droite du point z_0 . Nous pouvons donc obtenir une estimation de la solution (4.15) au point z_0^+ . Finalement nous itérons toute la procédure. Afin de montrer comment on peut contrôler la solution le long de la ligne de Stokes, nous introduisons les nouvelles variables

$$\widehat{a}_-(z) \equiv a_-(z), \quad (4.60)$$

$$\widehat{a}_+(z) \equiv a_+(z)e^{\frac{i}{\epsilon}\delta(z_0)}, \quad (4.61)$$

qui vérifient

$$\frac{d}{dz}\widehat{a}_-(z) = -\gamma(z)e^{\frac{i}{\epsilon}(\delta(z)-\delta(z_0))}\widehat{a}_+(z), \quad (4.62a)$$

$$\frac{d}{dz}\widehat{a}_+(z) = \gamma(z)e^{-\frac{i}{\epsilon}(\delta(z)-\delta(z_0))}\widehat{a}_-(z). \quad (4.62b)$$

Intégration le long d'une ligne de Stokes

Considérons tout d'abord un chemin dissipatif dans le plan complexe allant de z' à z paramétrisé par $u \rightarrow u + is = g(u)$, $u \in \mathbb{R}$ avec $g(\tau_0) = z'$ et $g(\tau) = z$ et tel que $\Im[\delta(g(u))]$ est une fonction non décroissante pour tout u et avec les conditions initiales $\widehat{a}_-(z') = 1$, $\widehat{a}_+(z') = 0$. En effectuant une intégration par parties dans les équations (4.63) le long du chemin g et en utilisant la notation $\|f\| = \sup_{u \in g} |f(u)|$, on obtient

$$|\widehat{a}_-(z)| \leq 1 + \epsilon k \left(\|\widehat{a}_-\| + \|e^{\frac{i}{\epsilon}(\delta-\delta(z_0))}\widehat{a}_+\| \right), \quad (4.63)$$

et

$$|e^{\frac{i}{\epsilon}(\delta-\delta(z_0))}\widehat{a}_+(z)| \leq \epsilon k \left(\|\widehat{a}_-\| + \|e^{\frac{i}{\epsilon}(\delta-\delta(z_0))}\widehat{a}_+\| \right) \quad (4.64)$$

pour chaque z appartenant au chemin g et k une constante positive indépendante de ϵ . En prenant maintenant le sup pour $z \in g$ et en sommant les deux inégalités précédentes, on

obtient

$$\|\widehat{a}_-\| + \|e^{\frac{i}{\epsilon}(\delta-\delta(z_0))}\widehat{a}_+\| \leq \frac{1}{1-2\epsilon k} \leq 1 + 2\epsilon k.$$

Dans la limite adiabatique, *i.e.* $\epsilon \rightarrow 0$, nous concluons que $\forall z \in g$,

$$\widehat{a}_-(z) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon), \tag{4.65a}$$

$$\widehat{a}_+(z) = \mathcal{O}\left(\epsilon e^{\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z)-\delta(z_0)]}\right). \tag{4.65b}$$

Considérons maintenant le chemin g' allant de z' à z tel que la fonction $\Im[\delta(z)]$ est décroissante le long g' . Autrement dit le chemin g' est anti-dissipatif. Un calcul similaire montre alors qu'on peut obtenir de l'information sur la solution en inversant les conditions initiales, *i.e.* $\widehat{a}_-(z') = 0$ et $\widehat{a}_+(z') = 1$:

$$\widehat{a}_-(z) = \mathcal{O}\left(\epsilon e^{-\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z)-\delta(z_0)]}\right), \tag{4.66a}$$

$$\widehat{a}_+(z) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon), \quad \forall z \in g'. \tag{4.66b}$$

Nous notons maintenant par $V(z, z')$ le propagateur solution de l'équation (4.63) et vérifiant

$$\begin{pmatrix} \widehat{a}_-(z) \\ \widehat{a}_+(z) \end{pmatrix} = V(z, z') \begin{pmatrix} \widehat{a}_-(z') \\ \widehat{a}_+(z') \end{pmatrix} \tag{4.67}$$

avec la condition initiale $V(z', z')=1$. Considérons tout d'abord un chemin dissipatif allant de z' à z . En tenant compte des conditions initiales $\widehat{a}_-(z') = 1$ et $\widehat{a}_+(z') = 0$, les équations (4.66) nous permettent dans ce cas d'estimer les éléments de matrice V_{ij} associés à la première colonne du propagateur $V(z, z')$:

$$V(z, z') = \begin{pmatrix} 1 + \mathcal{O}(\epsilon) & V_{12}(z, z') \\ \mathcal{O}\left(\epsilon e^{\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z)-\delta(z_0)]}\right) & V_{22}(z, z') \end{pmatrix}. \tag{4.68}$$

Maintenant pour estimer les éléments de matrice de la deuxième colonnes, nous utilisons l'identité $\det(V(z, z')) = 1$ (vu que l'Hamiltonien qu'on considère dans cette analyse est de trace nulle), soit

$$V(z', z) = V^{-1}(z, z') = \begin{pmatrix} V_{22}(z, z') & -V_{12}(z, z') \\ -V_{21}(z, z') & V_{11}(z, z') \end{pmatrix}. \tag{4.69}$$

Notons que s'il existe un chemin dissipatif g allant de z' à z tel que $\Im[\delta]$ est une fonction non décroissante le long de g , alors $\Im[\delta]$ est une fonction décroissante le long du chemin $g' = g^{-1}$ allant de z to z' . Nous pouvons donc utiliser l'équation (4.67) afin d'estimer l'élément de matrice $-V_{12}(z, z')$, soit

$$-V_{12}(z, z') = \mathcal{O}\left(\epsilon e^{-\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z')-\delta(z_0)]}\right). \tag{4.70}$$

Remarquons que les rôles des points z and z' sont inversés ici. Finalement s'il existe un chemin dissipatif g allant de z' à z tel que $\Im[\delta]$ est une fonction non décroissante le long g , alors le propagateur prend la forme

$$V(z, z') = \begin{bmatrix} 1 + \mathcal{O}(\epsilon) & \mathcal{O}\left(\epsilon e^{-\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z')-\delta(z_0)]}\right) \\ \mathcal{O}\left(\epsilon e^{\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z)-\delta(z_0)]}\right) & 1 + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}\left(\epsilon^2 e^{\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z)-\delta(z')]} \right) \end{bmatrix}, \tag{4.71}$$

où nous avons utilisé l'identité $\det(V(z, z')) = 1$ pour estimer l'élément de matrice $V_{22}(z, z')$. Maintenant si nous considérons le propagateur le long d'une branche de la ligne de Stokes $\sigma(\tau)$ ne contenant pas un point de transition et vu que $\Im(\delta(z)) = \Im(\delta(z')) = \Im(\delta(z_0))$ pour chaque $z \in \sigma(\tau)$, ce dernier prend la forme simple

$$V(z, z') = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (4.72)$$

Traitement au voisinage du point de transition

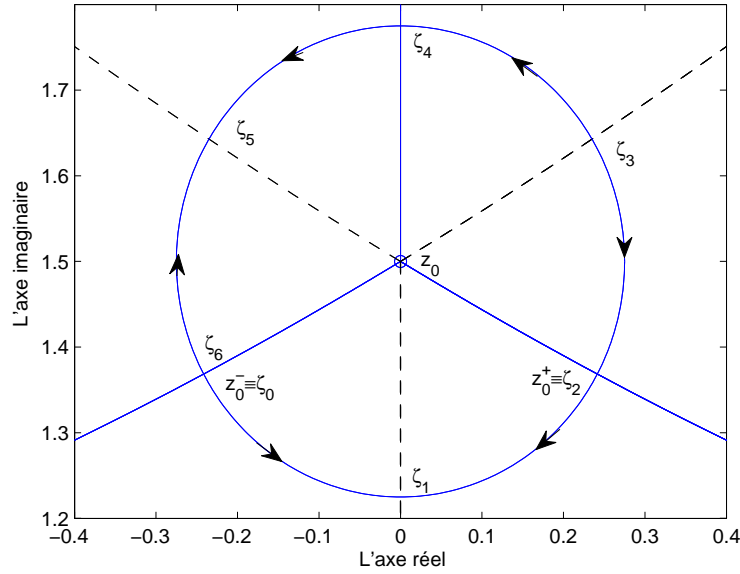


FIG. 4.5 – Les différents chemins dissipatifs autour du point de transition z_0 . Les flèches indiquent leurs sens.

Notre problème maintenant consiste à évaluer $V(z_0^+, z_0^-)$. Afin d'éviter le point de transition z_0 , nous devons quitter la ligne de Stokes au voisinage de ce point comme le montre la figure 4.4. Cependant, le chemin qu'on utilise pour connecter deux branches successives d'une ligne de Stokes ne peut pas être dissipatif comme le montre la figure 4.5. Néanmoins, nous pouvons exprimer les solutions des équation (4.62) sur la seconde branche de la ligne de Stokes en fonction de la solution calculée sur la première branche. La figure 4.5 montre en effet qu'on peut trouver des chemins dissipatifs autour du point z_0 passant par différents points ζ_j , $j = 0 \dots 6$. Par ailleurs, l'analyse de la section 4.2.3 montre que nous pouvons calculer le circuit $V(\zeta_0, \zeta_6)$ (voir l'équation (4.41)) [98]:

$$\begin{aligned} a_-(z) &= e^{-i\theta_+(0|\eta_0)} e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{\eta} \lambda_+(z) dz} \tilde{a}_+(z), \\ a_+(z) &= e^{-i\theta_-(0|\eta_0)} e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{\eta} \lambda_-(z) dz} \tilde{a}_-(z), \end{aligned} \quad (4.73)$$

où η_0 est une boucle orientée dans le sens des montres encerclant z_0 et basée à l'origine, et \tilde{a}_j est le prolongement analytique de a_j obtenu après une révolution autour de z_0 dans le sens négatif. Passant maintenant aux variables \hat{a}_j , nous pouvons écrire

$$\begin{pmatrix} \hat{a}_-(\zeta_0) \\ \hat{a}_+(\zeta_0) \end{pmatrix} = V(\zeta_0, \zeta_6) \begin{pmatrix} \hat{a}_-(\zeta_6) \\ \hat{a}_+(\zeta_6) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\theta_-(0|\eta_0)} e^{\frac{i}{\epsilon} \int_{\eta_0} \lambda_-(z) dz} e^{-\frac{i}{\epsilon} \delta(z_0)} \hat{a}_+(\zeta_0) \\ e^{i\theta_+(0|\eta_0)} e^{\frac{i}{\epsilon} \int_{\eta_0} \lambda_+(z) dz} e^{-\frac{i}{\epsilon} \delta(z_0)} \hat{a}_-(\zeta_0) \end{pmatrix}. \quad (4.74)$$

En utilisant maintenant le fait que

$$\delta(z_0) = \int_{\eta_0} \lambda_+(z) dz = - \int_{\eta_0} \lambda_-(z) dz, \quad (4.75)$$

nous obtenons

$$V(\zeta_0, \zeta_6) = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_-(0|\eta_0)} \\ e^{i\theta_+(0|\eta_0)} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.76)$$

En utilisant le résultat (4.76) et en tenant compte des chemins dissipatifs autour du point z_0 , on déduit (voir annexe C pour plus de détail) $V(z_0^+, z_0^-)$:

$$V(z_0^+, z_0^-) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ e^{-i\theta_-(0|\eta_0)} & 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (4.77)$$

Maintenant, nous répétons toute la procédure décrite précédemment le long d'une branche de la ligne de Stokes allant de z_0^+ jusqu'au voisinage du point de transition z_1 , nous introduisons la nouvelle variable $\hat{a}_+(z)$ par $e^{\frac{i}{\epsilon}\delta(z_1)} a_+(z)$. L'analyse locale autour z_1 reste la même et il suffit de remplacer $\theta_-(0|\eta_0)$ par $\theta_-(0|\eta_1)$, où η_1 est maintenant une boucle basée à l'origine encerclant z_1 . S'ils existent N points de transition sur la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel localisés dans le demi-plan complexe supérieur, nous concluons

$$a_-(+\infty) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon), \quad (4.78a)$$

$$a_+(\infty) = \sum_{j=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(z_j)} e^{-i\theta_-(0|\eta_j)} + \mathcal{O}\left(\epsilon e^{-\frac{1}{\epsilon}\Im[\delta(z_0)]}\right). \quad (4.78b)$$

Tenant compte des équations (4.78), (4.19) et la transformation (4.5), la probabilité de transition non adiabatique s'écrit pour le modèle original (4.3)

$$\begin{aligned} P_+(T) &= e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T\Im[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds]} \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_-(0|\eta_j)} e^{-iT\delta_0(z(j))} \right|^2 \\ &= e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T\Im[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds]} e^{2T\Im[\delta_0(z_0)]} \\ &\quad \times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_-(0|\eta_j)} e^{-iT\Re[\delta_0(z(j))]} \right|^2, \end{aligned} \quad (4.79)$$

où les N points de transition se localisent sur la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel dans le demi-plan supérieur défini comme

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1..N})] < 0. \quad (4.80)$$

Notons que si nous considérons une connexion initiale à l'état $|\varphi_+(-\infty)\rangle$, la probabilité de transition non adiabatique s'écrit dans ce cas

$$\begin{aligned} P_-(T) &= e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T\Im[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds]} \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_+(0|\eta_j)} e^{iT\delta_0(z(j))} \right|^2 \\ &= e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T\Im[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds]} e^{-2T\Im[\delta_0(z_0)]} \\ &\quad \times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_+(0|\eta_j)} e^{iT\Re[\delta_0(z(j))]} \right|^2, \end{aligned} \quad (4.81)$$

où les N points de transition se localisent sur la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel localisée dans le demi-plan complexe inférieur défini comme

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1..N})] > 0. \quad (4.82)$$

Les phases géométriques θ_{\pm} sont calculées dans l'annexe D et elles sont données par

$$\begin{aligned} e^{-i\theta_{\pm}(0|\eta_0)} &= e^{ik\pi} e^{\pm i \int_{\eta_0} \frac{B_3(z)(B_1(z)B_2'(z) - B_2(z)B_1'(z))}{2\sqrt{\rho(z)}(B_1^2 + B_2^2)} dz} \\ &= e^{ik\pi} e^{\pm i \int_{\eta_j} \frac{\cos\theta}{2\Theta} dz}. \end{aligned} \quad (4.83)$$

4.2.7 Choix de la ligne de Stokes et les points de transition

Nous avons mentionné ci-dessus que pour une condition initiale donnée, nous devons choisir la ligne de Stokes qui donne une valeur finie de la probabilité de transition. Cependant, nous avons remarqué que plusieurs lignes de Stokes peuvent satisfaire cette condition. Nous avons donc choisi parmi eux celui qui donne la plus grande contribution à la probabilité de transition. Autrement dit, celui qui donne la plus grande valeur de $|\Im[\delta_0(z_j)]|$. Cette exigence se généralise pour toutes les situations.

4.2.8 Comportement asymptotique des probabilités de transition

Dans cette section, nous analysons le comportement asymptotique des probabilités de transition. Soit $z = \tau + i\gamma_+$ un point de la ligne de Stokes tel que $\tau \rightarrow +\infty$. On a donc

$$\begin{aligned} \Im[\delta_0(z_0)] &= \Im[\delta_0(z)] \\ &= \Im \left[\int_0^{\tau} -\sqrt{\rho(s)} ds + \int_{\tau}^{\tau+i\gamma_+} -\sqrt{\rho(u)} du \right] \\ &\simeq -2\Im \left[\int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds \right] - \gamma_+ |\Delta_+|. \end{aligned} \quad (4.84)$$

Tenant compte de l'équation (4.79), on peut écrire

$$\begin{aligned} P_+(T) &= e^{-T\tau(\Gamma_+ + 2\Gamma_+ \text{sgn}(\Delta_+) + \Gamma_-)} e^{-T\Im \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\rho(s)} ds \right]} e^{2TC_+ |\Delta_+|} \\ &\times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_-(0|\eta_j)} e^{-iT\Re[\delta_0(z(j))]} \right|^2, \end{aligned} \quad (4.85)$$

soit,

$$P_+(T) = e^{-T\tau(\Gamma_+ + \Gamma_- + \Gamma_+ \text{sgn}(\Delta_+) - \Gamma_- \text{sgn}(\Delta_-))} e^{TC} \times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_-(0|\eta_j)} e^{-iT\Re[\delta_0(z(j))]} \right|^2, \quad (4.86)$$

où C est une constante négative. Pour une connexion initiale à l'état $|\varphi_-\rangle$ nous déduisons alors les comportements asymptotiques suivantes

$$(a) \quad \Delta_- > 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ < 0 : P_+(T) \propto e^{-T|C|}; \quad (4.87a)$$

$$(b) \quad \Delta_- < 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ > 0 : P_+(T) \propto e^{-2T\tau(\Gamma_+ + \Gamma_-) - T|C|}; \quad (4.87b)$$

$$(c) \quad \Delta_- > 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ > 0 : P_+(T) \propto e^{-2T\tau\Gamma_+ - T|C|}; \quad (4.87c)$$

$$(d) \quad \Delta_- < 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ < 0 : P_+(T) \propto e^{-2T\tau\Gamma_- - T|C|}. \quad (4.87d)$$

Pour une connexion initiale à l'état $|\varphi_+\rangle$, on obtient

$$P_-(T) = e^{-T\tau(\Gamma_++\Gamma_--\Gamma_+\text{sgn}(\Delta_+)+\Gamma_-\text{sgn}(\Delta_-))} e^{-TC} \times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_+(0|\eta_j)} e^{iT\Re[\delta_0(z(j))]} \right|^2, \quad (4.88)$$

où C est une constante positive. On déduit alors les comportements asymptotiques suivantes

$$(a) \quad \Delta_- > 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ < 0 : P_-(T) \propto e^{-2T\tau(\Gamma_++\Gamma_-)-T|C|}; \quad (4.89a)$$

$$(b) \quad \Delta_- < 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ > 0 : P_-(T) \propto e^{-T|C|} \quad (4.89b)$$

$$(c) \quad \Delta_- > 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ > 0 : P_-(T) \propto e^{-2T\tau\Gamma_- - T|C|}; \quad (4.89c)$$

$$(d) \quad \Delta_- < 0 \quad \text{et} \quad \Delta_+ < 0 : P_-(T) \propto e^{-2T\tau\Gamma_+ - T|C|}. \quad (4.89d)$$

Les équations (4.87) et (4.89) montrent qu'à l'exception des cas (a) pour $P_+(T)$ et (b) pour $P_-(T)$ qui correspondent à une connexion initiale à l'état le moins dissipatif pour un modèle avec croisement d'énergie, les probabilités de transitions non adiabatiques tendent en général exponentiellement vers 0 quand $\tau \rightarrow +\infty$ et $\Gamma_{\pm} \neq 0$. Cependant, quand $\Gamma_{\pm} = 0$, les probabilités de transition se comportent comme $e^{-T|C|}$ ce qui est similaire aux cas des systèmes non dissipatifs.

4.3 Applications: Le modèle Allen-Eberly dissipatif

4.3.1 Cas d'une dissipation dépendante du temps

Nous considérons tout d'abord un passage adiabatique dans un modèle avec croisement des parties imaginaires des valeurs propres et qui mène à un transfert de population de l'état fondamental à l'état excité à la fin de l'interaction. Nous étudions dans cette section la dynamique du modèle Allen-Eberly [47] défini comme $\Omega(\tau) = \Omega_0 \text{sech}(\tau)$ et $\Delta(\tau) = \Delta_0 \tanh(\tau)$, pour lequel une dissipation dépendante du temps est ajoutée $\Gamma(\tau) = \Gamma_0 \text{sech}(\tau)$. Nous avons montré dans le chapitre 3 qu'un tel modèle peut décrire un processus de transfert de population entre un état fondamental à un état excité couplé à un continuum. Nous avons montré dans la section 4.2 que pour le cas d'une dissipation dépendante du temps, on peut trouver deux branches de ligne de Stokes qui sont bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$ (voir figure 4.6) et donc les résultats (4.79) et (4.81) s'appliquent directement. Notons que la fonction secante hyperbolique ne satisfait pas la condition (2) mentionnée plus haut vu qu'elle est singulière aux points

$$z_s(k) = i\pi\left(k + \frac{1}{2}\right), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.90)$$

Cependant, si nous définissons le domaine qui est borné par l'axe réel et la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel, alors on peut montrer qu'il ne contient pas de singularité (voir figure 4.6). Autrement dit, la condition (2) est satisfaite à l'intérieur de ce domaine. Les points de transition sont donnés par

$$z^{\pm}(k) = (-1)^k \text{arcsinh} \left[i \left(\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0} \right) \right] + ki\pi, \quad (4.91)$$

$k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ Leurs localisations dans le plan complexe dépendent de l'inégalité $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| < 1$ ou $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| \geq 1$. Pour $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| < 1$, les points de transition sont tous localisés le long de l'axe

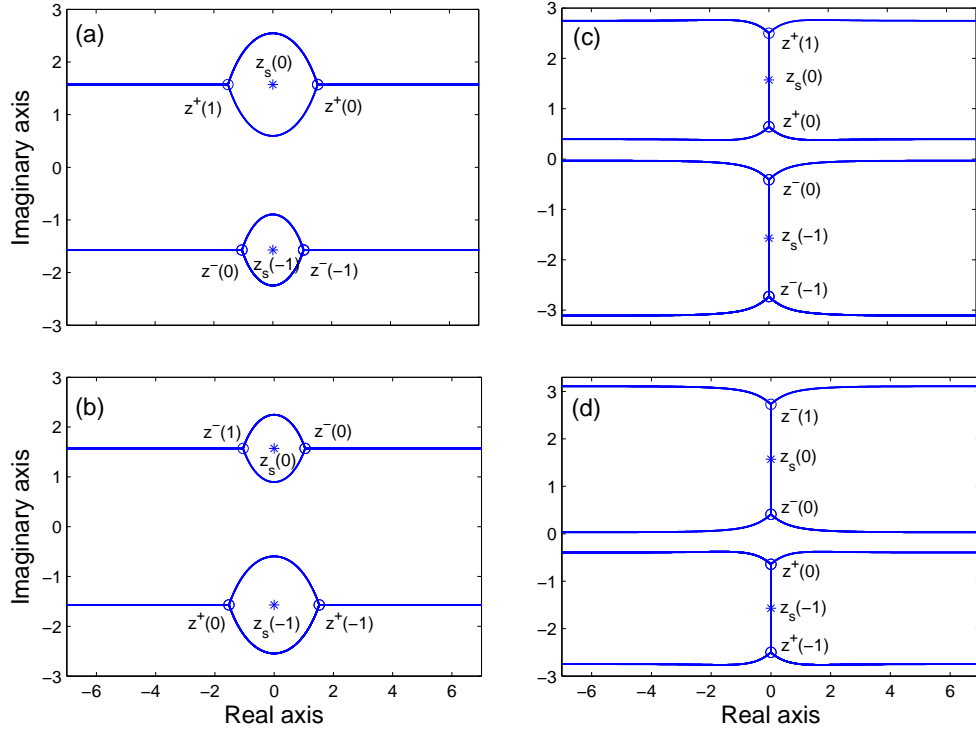


FIG. 4.6 – Les premières lignes de Stokes localisées dans le plan complexe inférieur (respectivement supérieur) qui doivent être considérées lorsque le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_+(-\infty)\rangle$, (respectivement $|\varphi_-(-\infty)\rangle$), associées au modèle Allen-Eberly dissipatif avec $\Gamma(\tau) = \Gamma_0 \operatorname{sech}(\tau)$ et $\Gamma_0 = 0.2\Omega_0$. Deux exemples typiques pour $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| > 1$: (a) $T\Omega_0 = 8$, $\Delta_0 = \Omega_0/2$, (b) $T\Omega_0 = 8$, $\Delta_0 = -\Omega_0/2$; et deux exemples typiques pour $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| < 1$: (c) $T\Omega_0 = 4$, $\Delta_0 = 2\Omega_0$, (d) $T\Omega_0 = 4$, $\Delta_0 = -2\Omega_0$. Les premières singularités et les points de transition sont montrés respectivement par les symboles '*' et 'o'.

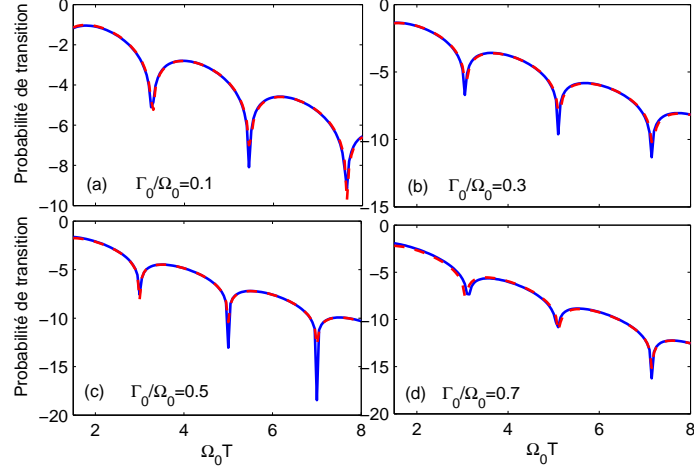


FIG. 4.7 – Les probabilités de transition non adiabatiques (à l'échelle logarithmique) obtenues par le calcul numérique (trait bleu plein) et la formule (4.94) (tirets rouges) pour $\Delta_0 = \Omega_0/2$ et (a) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.1$, (b) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.3$, (c) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.5$ et (d) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.7$.

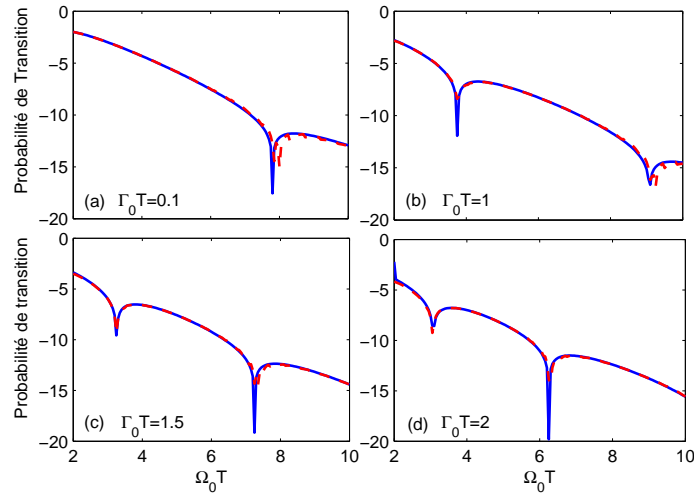


FIG. 4.8 – Comme dans la figure 4.7 mais pour $\Delta_0 T = (\Omega_0 - 0.5)T$ et (a) $\Gamma_0 T = 0.1$, (b) $\Gamma_0 T = 1$, (c) $\Gamma_0 T = 1.5$ et (d) $\Gamma_0 T = 2$.

imaginaire :

$$z^\pm(k) = i \left\{ \mp (-1)^k \operatorname{sgn}(\Delta_0) \operatorname{acos} \left(\frac{\Omega_0 \pm \Gamma_0}{|\Delta_0|} \right) + \left[k \pm \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\Delta_0) (-1)^k \right] \pi \right\}, \quad (4.92)$$

et pour $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| > 1$, ils apparaissent par paires symétriques par rapport à l'axe imaginaire :

$$z^\pm(k) = \pm (-1)^k \operatorname{sgn}(\Delta_0) \operatorname{acosh} \left(\frac{\Omega_0 \pm \Gamma_0}{|\Delta_0|} \right) + i \left[k \pm \frac{1}{2} \operatorname{sgn}(\Delta_0) (-1)^k \right] \pi. \quad (4.93)$$

Dans le cas particulier où $|\frac{\Gamma_0 \pm \Omega_0}{\Delta_0}| \rightarrow 1$, les points de transition $z^\pm(k)$ tendent vers les singularités $z_s(k)$ par paires. Les lignes de Stokes ainsi que les points de transition sont montrés dans la figure 4.6. Pour $|\frac{\Gamma_0 + \Omega_0}{\Delta_0}| > 1$ et une connection initiale à l'état $|\varphi_-(-\infty)\rangle$ vérifiant $\Delta_- < 0$ (i.e. $\Delta_0 > 0$ et $|\phi(-\infty)\rangle = |2\rangle$), la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel dans le demi-plan complexe supérieur traverse l'axe imaginaire et connecte les deux points de transition $z^+(1)$ and $z^+(0)$, comme le montre la figure 4.6. On conclut donc d'après l'analyse précédente, que $z^+(1)$ et $z^+(0)$ sont les points de transition qui ont la contribution la plus dominante pour le calcul de la probabilité de transition non adiabatique. Notons que dans ce modèle nous avons considéré un couplage Ω réel, i.e. $B_2 = 0$; les phases géométriques $e^{-i\theta_-(0)\eta_0}$ et $e^{-i\theta_-(0)\eta_1}$ se réduisent donc à 1. En utilisant l'équation (4.79), nous obtenons

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds \right]} \left| \sum_{j=0}^1 e^{-iT \delta_0(z^+(j))} \right|^2. \quad (4.94)$$

Nous avons calculé numériquement la probabilité de transition non adiabatique et nous l'avons comparé avec la formule (4.94). Le résultat est présenté dans la figure 4.7 pour un rapport de $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0}$ fixé et en variant $\Omega_0 T$ et dans la figure 4.8 pour un $\Gamma_0 T$ fixé et en variant $\Omega_0 T$. Nous avons trouvé un bon accord même pour des valeurs faibles de $\Omega_0 T$. La figure 4.6 montre les autres situations qui correspondent à $|\frac{\Gamma_0 + \Omega_0}{\Delta_0}| > 1$ (cas (a) et (b)). En effet, lorsque le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_-(-\infty)\rangle$ et avec un écart à la résonance positif $\Delta_- > 0$ (i.e. $\Delta_0 < 0$ et $|\phi(-\infty)\rangle = |1\rangle$), la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel passe par les deux points $z^-(1)$ et $z^-(0)$. La probabilité de transition non adiabatique s'écrit dans ce cas

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds \right]} \left| \sum_{j=0}^1 e^{-iT \delta_0(z^-(j))} \right|^2. \quad (4.95)$$

Dans le cas opposé où le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_+(-\infty)\rangle$ et avec un écart à la résonance initialement négatif $\Delta_- < 0$ (i.e. $\Delta_0 > 0$ et $|\phi(-\infty)\rangle = |1\rangle$), la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel dans le demi-plan complexe inférieur passe par les deux points $z^-(0)$ et $z^-(1)$. La probabilité de transition non adiabatique s'écrit dans ce cas

$$P_-(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds \right]} \left| \sum_{j=0}^{-1} e^{iT \delta_0(z^-(j))} \right|^2. \quad (4.96)$$

Si maintenant nous considérons que le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_+(-\infty)\rangle$ mais pour un écart à la résonance initialement positif : $\Delta_- > 0$ (i.e. $\Delta_0 < 0$ et $|\phi(-\infty)\rangle = |2\rangle$), alors la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel localisée dans le demi-plan inférieur passe par les deux points $z^+(0)$ et $z^+(-1)$. Dans ce cas la probabilité de transition non adiabatique s'écrit

$$P_-(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds \right]} \left| \sum_{j=0}^{-1} e^{iT \delta_0(z^+(j))} \right|^2. \quad (4.97)$$

Dans la situation où $|\frac{\Gamma_0 + \Omega_0}{\Delta_0}| < 1$, la figure 4.6 montre les différents points de transition

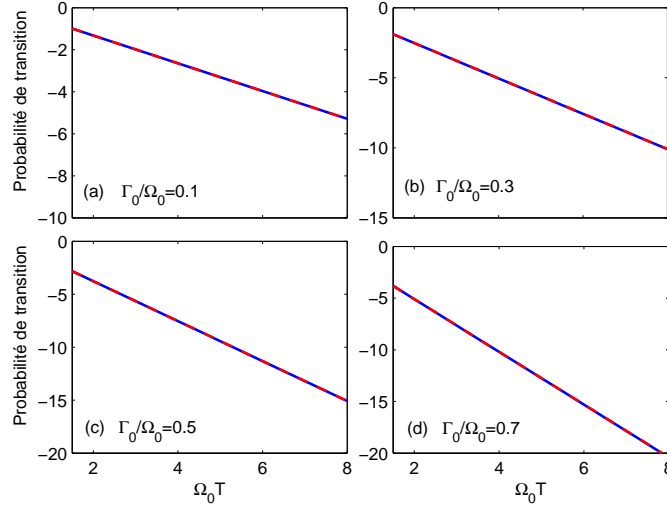


FIG. 4.9 – Les probabilités de transition non adiabatiques (à l'échelle logarithmique) obtenues par le calcul numérique (lignes pleines) et la formule (4.98) (tirets rouges) pour $\Delta_0 = 2\Omega_0$ and (a) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.1$, (b) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.3$, (c) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.5$ and (d) $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0} = 0.7$.

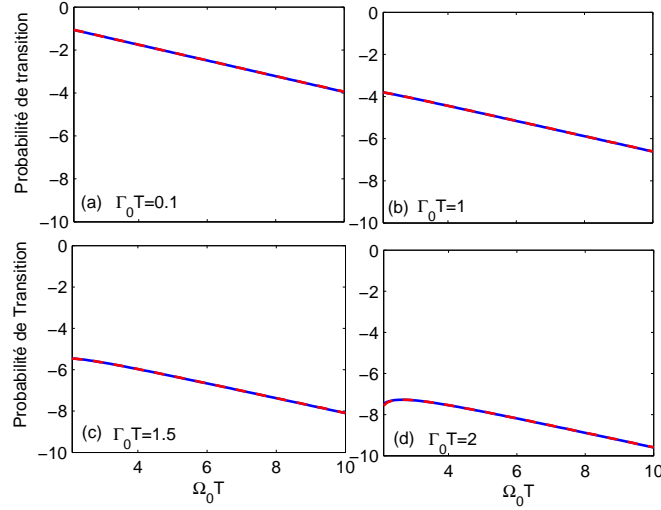


FIG. 4.10 – Comme dans la figure 4.9 mais pour $\Delta_0 T = 2\Omega_0 T$ et (a) $\Gamma_0 T = 0.1$, (b) $\Gamma_0 T = 1$, (c) $\Gamma_0 T = 1.5$ et (d) $\Gamma_0 T = 2$.

que doivent être pris en compte pour le calcul de la probabilité de transition. Prenons par exemple le cas lorsque le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_-(-\infty)\rangle$ et avec un écart à la résonance initialement négatif $\Delta_- < 0$. La ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel localisée dans le demi-plan complexe supérieur (le cas (c)) connecte les deux points de transition $z^+(0)$ et $z^+(1)$, mais, à travers la singularité $z_s(0)$. Nous avons remarqué cependant qu'il existe une ligne de Stokes infinie⁵ qui passe seulement par $z^+(0)$, le point de transition le plus proche de l'axe réel. Nous concluons donc d'après l'analyse précédente que $z^+(0)$ est

5. le mot infini signifie que la ligne de Stokes est bornée à $\tau = \pm\infty$.

le point de transition qui a la contribution la plus dominante pour le calcul de la probabilité de transition non adiabatique, soit

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im [\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds]} e^{-2T \Im [\delta_0(z^+(0))]} \quad (4.98)$$

La comparaison entre le calcul numérique et la formule (4.98) est montrée dans la figure 4.9 pour différentes valeurs de $\frac{\Gamma_0}{\Omega_0}$ et dans la figure 4.10 pour un taux de dissipation Γ_0 fixe. Nous avons obtenu dans ce cas un bon accord même pour des valeurs faibles de $\Omega_0 T$. Dans le cas particulier où $|\frac{\Gamma_0 + \Omega_0}{\Delta_0}| = 1$, tous les points de transition $z^+(k)$ tendent vers les singularités par paires, en particulier on

$$z^+(0) = z^+(1) = z_s(0). \quad (4.99)$$

La figure 4.11 (a) montre que la formule (4.98) ne donne pas le résultat correct si nous

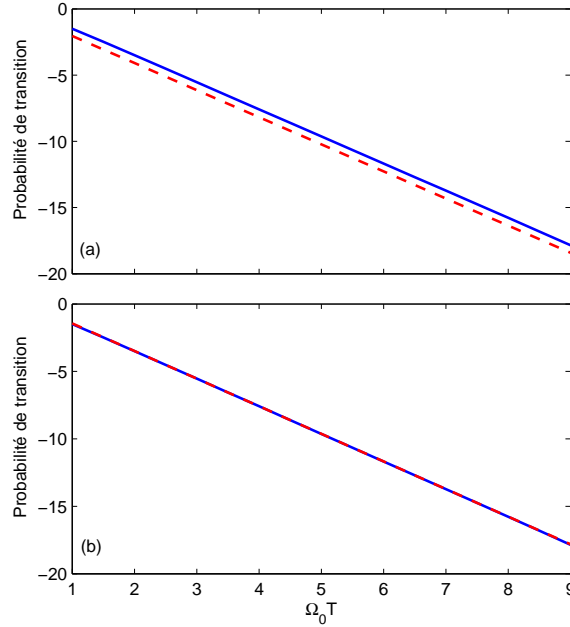


FIG. 4.11 – Les probabilités de transition non adiabatiques (à l'échelle logarithmique) obtenues par le calcul numérique (lignes bleues pleines) et les formules asymptotiques (tirets rouges) pour $\Gamma_0 = \Omega_0/4$ et $\Delta_0 = \Omega_0(1 + \frac{1}{4})$: (a) seulement la singularité $z_s(0)$ a été prise en compte (4.98) et (b) les deux points de transition $z^+(0)$ and $z^+(1)$ sont pris en compte (4.100).

considérons uniquement le point singulier $z_s(0)$. cependant elle devient juste si nous tenons compte des deux points de transition $z^+(0)$ et $z^+(1)$: Comme si la singularité était ignorée. La probabilité de transition non adiabatique est dans ce cas

$$P_+(T) = 4e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im [\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds]} e^{-2T \Im [\delta_0(z^+(0))]} \quad (4.100)$$

La comparaison entre le calcul numérique et la formule (4.100) est présentée dans la figure 4.11 (b) pour $\Gamma_0 = \Omega_0/4$ et $\Delta_0 = \Omega_0(1 + \frac{1}{4})$.

4.3.2 Cas d'une dissipation constante

Dans cette section, nous considérons la situation lorsque les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$. Nous avons montré qu'une telle situation apparaît lorsque le taux de

dissipation est constant, i.e.

$$\Gamma(\tau) = \Gamma_0 = \text{Const} > 0. \quad (4.101)$$

Dans la suite, nous allons construire les chemins dissipatifs qui nous permettent de démontrer les formules (4.79) et (4.81). Ces formules seront aussi testées numériquement. Les points de transition sont donnés dans ce cas par

$$z^\pm(k) = \operatorname{arctanh} \left[i \frac{\Gamma_0 \Delta_0 \pm \Omega_0 \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2 - \Omega_0^2}}{\Delta_0^2 - \Omega_0^2} \right] + ik\pi, \quad \text{pour } \Omega_0 \leq \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2},$$

$$z^\pm(k) = \operatorname{arctanh} \left[\frac{i\Gamma_0 \Delta_0 \pm \Omega_0 \sqrt{-\Gamma_0^2 - \Delta_0^2 + \Omega_0^2}}{\Delta_0^2 - \Omega_0^2} \right] + ik\pi, \quad \text{pour } \Omega_0 > \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2},$$

et

$$z(k) = \operatorname{arctanh} \left[i \frac{\Omega_0^2 - \Gamma_0^2}{2\Omega_0 \Gamma_0} \right] + ik\pi \quad \text{pour } \Omega_0 = \Delta_0 \quad (4.102)$$

avec $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Les premières lignes de Stokes et les points de transition sont présentés

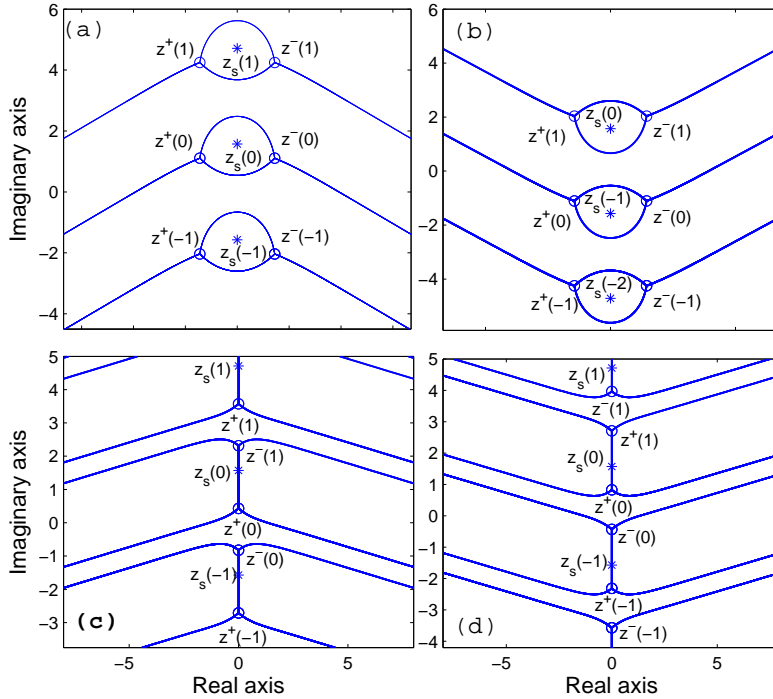


FIG. 4.12 – Les premières lignes de Stokes dans le plan complexe associées au modèle Allen-Eberly dissipatif pour le cas d'un taux de dissipation Γ_0 constant pour $\Omega_0 > \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$ (cas (a) et (b)) et pour $\Omega_0 < \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$ (cas (c) et (d)), avec $\Delta_- \equiv -\Delta_0 = -\Delta_+ > 0$ (cas (a) et (c)) et $\Delta_- \equiv -\Delta_0 = -\Delta_+ < 0$ (cas (b) et (d)). Les paramètres utilisés sont (a) $\Omega_0 = 5\Gamma_0$, $\Delta_0 = -2\Gamma_0$; (b) $\Omega_0 = 5\Gamma_0$, $\Delta_0 = 2\Gamma_0$; (c) $\Omega_0 = 3\Gamma_0$, $\Delta_0 = -5\Gamma_0$; (d) $\Omega_0 = 3\Gamma_0$, $\Delta_0 = 5\Gamma_0$.

dans la figure 4.12 pour différentes valeurs des paramètres Δ_0 , Ω_0 et Γ_0 . Pour $\Omega_0 > \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$,

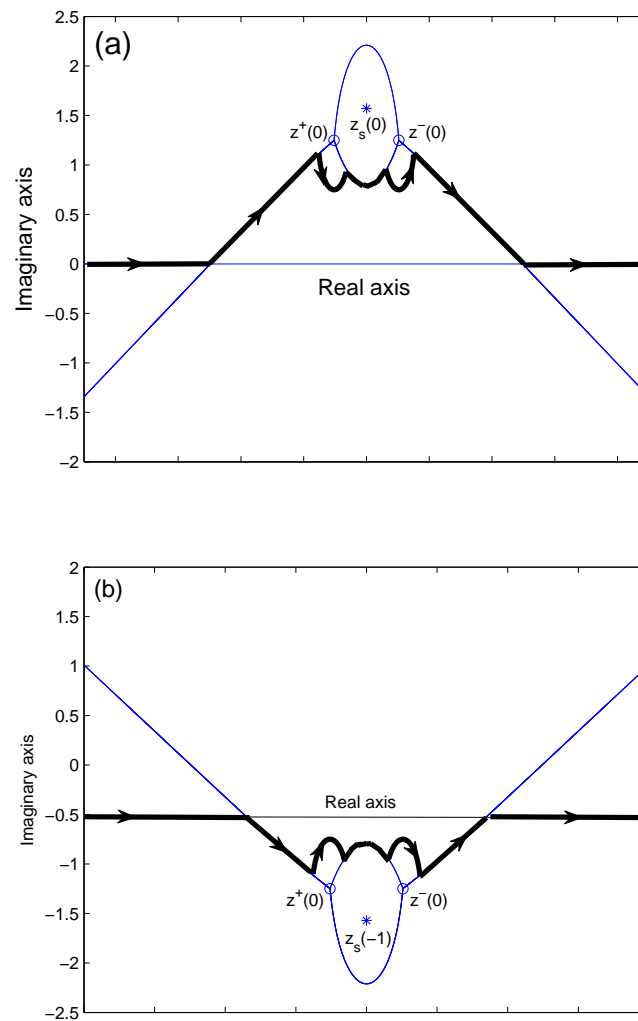


FIG. 4.13 – Les chemins d'intégration utilisés dans le plan complexe lorsque la dissipation est constante avec $\Omega_0 > \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$ et (a) $\Delta_- = -\Delta_0 > 0$, (b) $\Delta_- = -\Delta_0 < 0$.

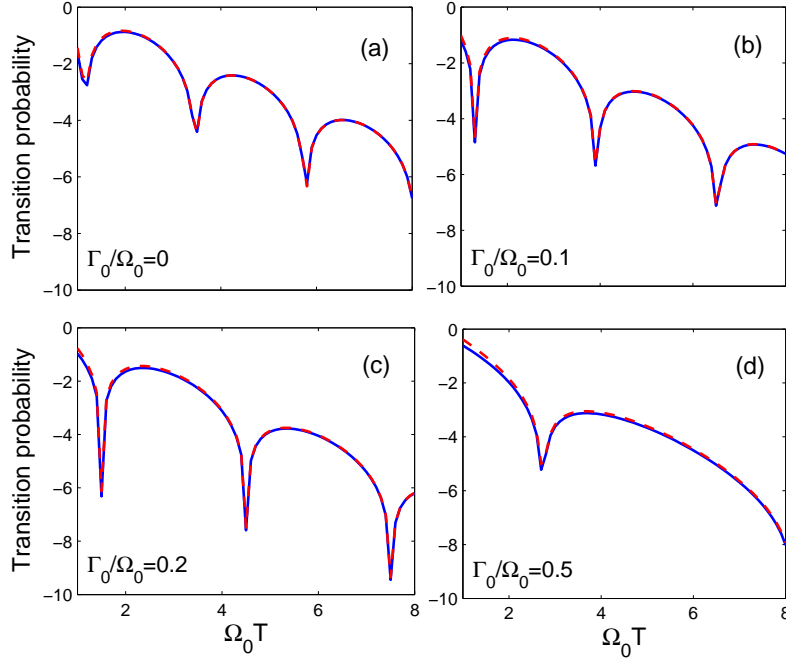


FIG. 4.14 – Les probabilités de transition non-adiabatiques obtenues par le calcul numérique (lignes bleues pleines) et la formule (4.103) (tirets rouges) associées au modèle Allen-Eberly pour un taux de dissipation Γ_0 constant et $\Delta_0 = -0.5\Omega_0$ vérifiant $\Omega_0 > \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$.

les points de transition apparaissent par paires symétriques par rapport à l'axe imaginaire (cas (a) et (b)) et pour $\Omega_0 \leq \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$, ils sont tous localisés sur l'axe imaginaire (cas (c) et (d)). Considérons tout d'abord la situation où le système est initialement connecté à l'état $-$: $|\phi(-\infty)\rangle = -|\varphi_-(-\infty)\rangle = |1\rangle$ (connection au vecteur propre le moins dissipatif $\Delta_0 < 0$). La figure 4.13(a) montre dans ce cas le chemin dissipatif qu'on peut utiliser pour intégrer l'équation de Schrödinger. La probabilité de transition non adiabatique est alors donnée par

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im [\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds]} \left| e^{-iT\delta_0(z^+(0))} + e^{-iT\delta_0(z^-(0))} \right|^2. \quad (4.103)$$

La comparaison entre le calcul numérique et la formule (4.103) est montrée dans la figure 4.14 pour des valeurs de Γ_0/Ω_0 fixées et en variant $\Omega_0 T$. Nous avons obtenu un bon accord même pour des valeurs petites de $\Omega_0 T$. Si nous considérons maintenant la situation où $\Omega_0 < \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$, la première ligne de Stokes connecte les deux points de transition $z^+(0)$ et $z^-(0)$ mais à travers la singularité $z_s(0)$. Nous avons considéré dans ce cas seulement le point de transition $z^+(0)$, le point le plus proche de l'axe réel localisé dans le demi-plan complexe supérieur. La probabilité de transition non adiabatique se réduit alors à

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im [\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds]} e^{2T \Im [\delta_0(z^+(0))]} \quad (4.104)$$

La comparaison entre le calcul numérique et la formule (4.104) est montrée dans la figure (4.15) pour Γ_0/Ω_0 fixé et en variant $\Omega_0 T$.

Dans la situation opposée, lorsque $|\phi(-\infty)\rangle = |\varphi_+(-\infty)\rangle = |1\rangle$, ce qui correspond à $\Delta(-\infty) = -\Delta_0 < 0$, (i.e. $\Delta_0 > 0$), la probabilité de transition non adiabatique est donnée par

$$P_-(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im [\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds]} \left| e^{iT\delta_0(z^+(0))} + e^{iT\delta_0(z^-(0))} \right|^2, \quad (4.105)$$

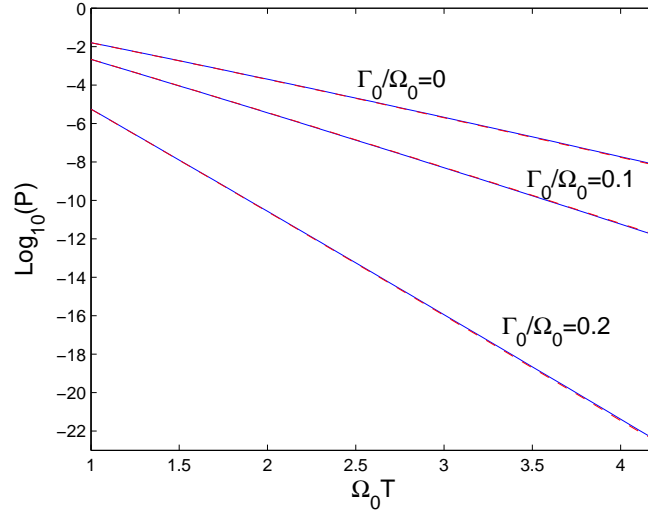


FIG. 4.15 – Les probabilités de transition non adiabatiques obtenues par le calcul numérique (lignes pleines bleues) et la formule (4.104) (tirets rouges) associées au modèle Allen-Eberly pour un taux de dissipation Γ_0 constant et $\Delta_0 T = \Omega_0 T + 10$ vérifiant $\Omega_0 < \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$.

où les deux points de transition $z^+(0)$ et $z^-(0)$ se localisent sur la première ligne de Stokes dans le plan complexe inférieur. Si nous considérons maintenant la situation où $\Omega_0 < \sqrt{\Gamma_0^2 + \Delta_0^2}$, la première ligne de Stokes connecte les deux points de transition $z^-(0)$ et $z^+(-1)$ mais à travers la singularité $z_s(-1)$. nous avons considéré dans ce cas seulement le point $z^-(0)$, le plus proche de l'axe réel dans le plan complexe inférieur. La probabilité de transition non adiabatique est donnée dans ce cas par

$$P_-(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im [\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds]} e^{-2T \text{Im}[\delta_0(z^-(0))]} \quad (4.106)$$

4.4 Application au modèle Rosen Zener dissipatif

La dynamique typique d'un modèle sans croisement des parties imaginaires des valeurs propres peut être étudiée par le modèle Rosen Zener model [51] défini comme

$$\Omega(\tau) = \Omega_0 \text{sech}(\tau), \quad \Delta(\tau) = \Delta_0 = \text{Const}, \quad (4.107)$$

pour lequel nous ajoutons un taux de dissipation constant Γ_0 . Les points de transition sont donnés par

$$z^\pm(k) = \alpha_\pm + i\beta_{\pm,k} \quad (4.108)$$

avec

$$\alpha_\pm = \pm \text{sgn}(\Delta_0) \text{acosh} \left[\sqrt{\frac{\sigma_0^2 + \sqrt{\sigma_0^4 - 4\Omega_0^2 \Delta_0^2}}{2(\Delta_0^2 + \Gamma_0^2)}} \right], \quad (4.109a)$$

$$\beta_{\pm,k} = \pm \text{acos} \left[\sqrt{\frac{\sigma_0^2 - \sqrt{\sigma_0^4 - 4\Omega_0^2 \Delta_0^2}}{2(\Delta_0^2 + \Gamma_0^2)}} \right] + \left(k + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad (4.109b)$$

et

$$\sigma_0^2 = \Omega_0^2 + \Delta_0^2 + \Gamma_0^2, \quad (4.110)$$

avec $k = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$. Les premières lignes de Stokes et les points de transition sont présentés dans la figure 4.16. Pour $\Delta_0 > 0$ (Fig. 4.16a), ce qui correspond à la connexion initiale du système à l'état $-$: $|\phi(-\infty)\rangle = -|\varphi_-(-\infty)\rangle = |1\rangle$, la pente de la ligne de Stokes reste positive tout au long de la dynamique. Nous avons la situation opposée si nous considérons un écart à la résonance initial négatif $\Delta_0 < 0$ qui correspond dans ce cas à une connexion initiale à l'état $+$ (voir Fig.4.16b).

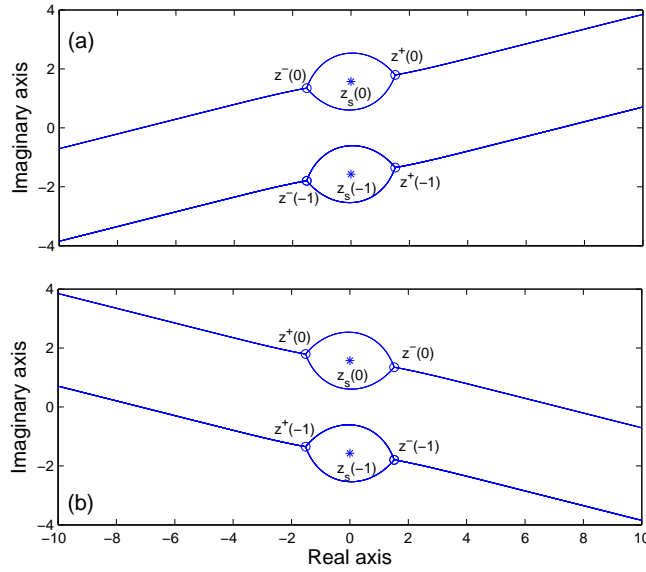


FIG. 4.16 – Les premières lignes de Stokes dans le plan complexe associée au modèle Rosen Zener pour le cas où le taux de dissipation est constant: (a) pour $\Delta_0 > 0$ et (b) pour $\Delta_0 < 0$.

Dans la suite, nous considérons les premières lignes de Stokes qui passent par les points de transition les plus proches de l'axe réel et qui ont la contribution la plus dominante pour le calcul de la probabilité de transition non adiabatique. Considérons tout d'abord le cas où le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_-\rangle$. La figure 4.17(a) montre le chemin d'intégration dans le plan complexe qu'il faut considérer dans ce cas pour calculer la probabilité de transition. Nous obtenons

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds \right]} \times \left| e^{-iT \delta_0(z^+(0))} - e^{-iT \delta_0(z^-(0))} \right|^2, \quad (4.111)$$

où les deux points de transition $z^+(0)$ et $z^-(0)$ se localisent sur la première ligne de Stokes dans le plan complexe supérieur. La figure 4.17(b) montre également le chemin d'intégration qu'on peut utiliser dans la situation opposée lorsque le système est initialement connecté à

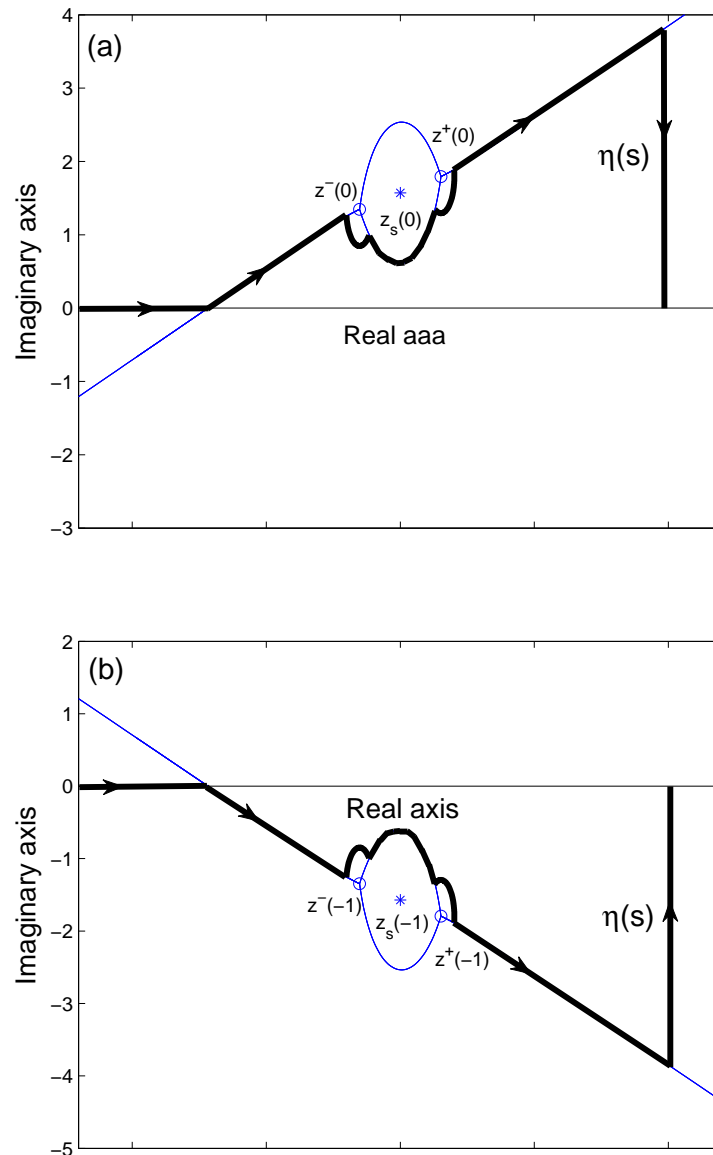


FIG. 4.17 – Les chemins d'intégration utilisés pour calculer la probabilité de transition non adiabatique pour le modèle Rosen Zener: (a) pour $\Delta_0 > 0$ et (b) pour $\Delta_0 < 0$. Les chemins verticaux et horizontaux sont dissipatifs dans les deux situations.

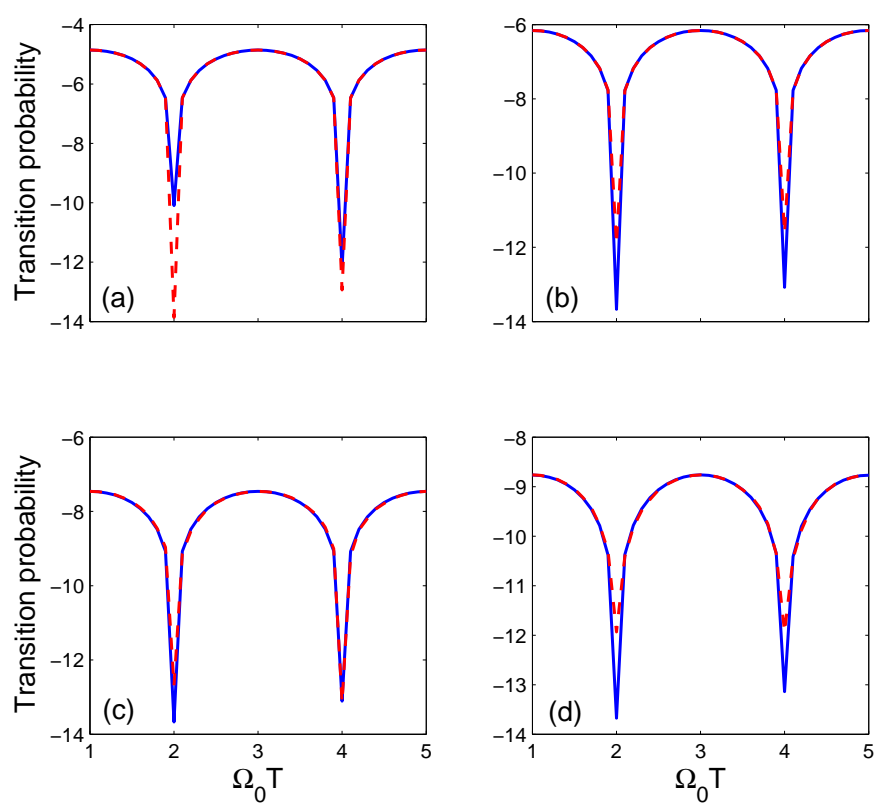


FIG. 4.18 – Les probabilités de transition non adiabatiques (à l'échelle logarithmique) obtenues numériquement (lignes pleines bleues) et la formule (4.111) (tirets rouges) pour le modèle Rosen-Zener: (a) $\Gamma_0 T = 0$, (b) $\Gamma_0 T = 0.1$, (c) $\Gamma_0 T = 0.2$ et (d) $\Gamma_0 T = 0.3$.

l'état $|\varphi_+\rangle$. La probabilité de transition est donnée dans ce cas par

$$P_-(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds \right]} \times \left| e^{iT\delta_0(z^-(-1))} - e^{iT\delta_0(z^+(-1))} \right|^2, \quad (4.112)$$

où les deux points de transition $z^{-1}(-)$ et $z^+(-1)$ se localisent maintenant sur la première ligne de Stokes dans le plan complexe inférieur.

La comparaison entre le calcul numérique et la formule (4.111) est présentée dans la figure. 4.18 pour plusieurs valeurs de Γ_0 et montre un bon accord.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons généralisé la formule de Davis-Dykhne-Pechukas à des systèmes dissipatifs à deux niveaux en utilisant la méthode du temps complexe. Les principales formules établies (équations (4.80) et (4.81)) stipulent que la probabilité de transition non adiabatique à la fin de l'interaction dépendent des points de transition dans le plan complexe définis comme des zéros simples du prolongement analytique de la différence des valeurs propres du système. Nous avons montré en particulier le rôle capital que jouent les lignes de Stokes dans ce genre de problème. En effet, ces lignes nous permettent de sélectionner les points de transition qui auront la contribution la dominante dans la formule de DDP.

Toutefois, la validité des formules (4.79) et (4.81) est garantie par l'existence d'un chemin dissipatif qui se connecte à l'axe réel à $\tau \rightarrow \pm\infty$. Nous avons montré que lorsque la dissipation vérifie $\Gamma(\pm\infty) = 0$, nous retrouvons la situation qui est similaire aux cas des systèmes non dissipatifs puisque les lignes de Stokes sont bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$. Dans l'autre cas où $\Gamma(\pm\infty) \neq 0$, la situation est différente vu que les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$ et nous sommes alors contraints de déformer le contour d'intégration afin de se connecter à l'axe réel. Dans le chapitre suivant, nous allons formuler et analyser la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux dans la limite adiabatique. Plus particulièrement dans une situation au delà d'une dissipation modéréé. Nous appliquerons également un traitement superadiabatique Nous utiliserons en particulier les résultats établis dans ce chapitre.

– RÉSUMÉ DU CHAPITRE 4 –

OBJECTIF : Dans ce chapitre, nous avons généralisé la formule de Davis-Dykhne-Pechukas qui donne la probabilité de transition non adiabatique à des systèmes à deux niveaux en utilisant la méthode des temps complexes.

RÉSULTATS :

- ① Quand le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_-(\infty)\rangle$, la probabilité de transition non adiabatique est donnée à la fin de l'interaction par

$$P_+(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_-(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_+(s) ds \right]} \times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_-(0|\eta_j)} e^{-iT\delta_0(z_j)} \right|^2, \quad (4.113)$$

où les N points de transition z_j se trouvent sur *la ligne ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel* localisée dans le plan complexe *supérieur* et vérifiant

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1, N-1})] < 0 \quad (4.114)$$

- ② Quand le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_+(\infty)\rangle$, la probabilité de transition non adiabatique est donnée à la fin de l'interaction par

$$P_-(T) = e^{-T \int_{-\infty}^{+\infty} \Gamma(s) ds} e^{2T \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(s) ds + \int_0^{+\infty} \lambda_-(s) ds \right]} \times \left| \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_+(0|\eta_j)} e^{iT\delta_0(z_j)} \right|^2, \quad (4.115)$$

où les N points de transition z_j se trouvent sur *la ligne ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel* localisée dans le plan complexe *inférieur* et vérifiant

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1, N-1})] > 0 \quad (4.116)$$

Annexe C

Preuve de la formule (4.77)

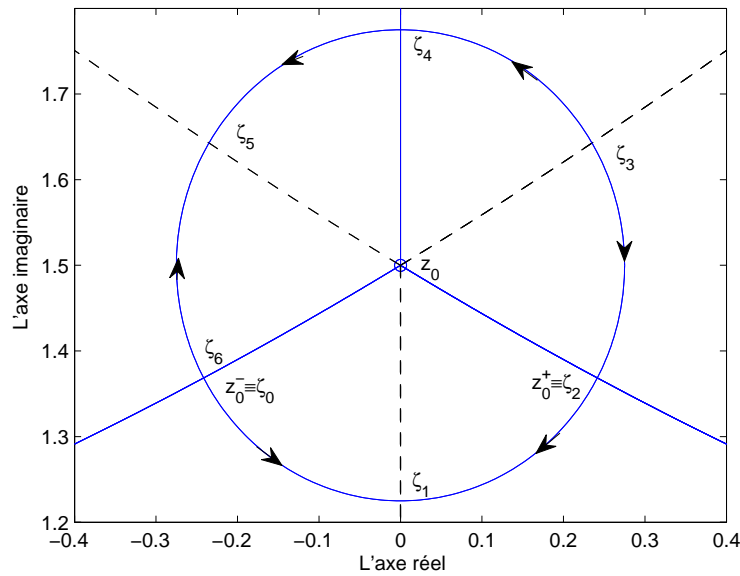


FIG. C.1 – Les différents chemins dissipatifs autour du point de transition z_0 . Les flèches indiquent leurs sens.

Considérons l'existence des chemins dissipatifs autour du point de transition z_0 , passant par différents points ζ_j , $j = 0, \dots, 6$ avec $\zeta_0 \equiv z_0^-$ et $\zeta_2 \equiv z_0^+$, comme le montre la figure C.1. En utilisant la relation

$$V(\zeta_1, \zeta_0) = V(\zeta_1, \zeta_2)V(\zeta_2, \zeta_0), \quad (\text{C.1})$$

et la notation

$$V_{ij}(\zeta_\mu, \zeta_\nu) = V_{ij}(\mu, \nu), \quad (\text{C.2})$$

nous obtenons les relations suivantes

$$V_{11}(2,0) = \frac{V_{11}(1,0)}{V_{11}(1,2)} - \frac{V_{12}(1,2)}{V_{11}(1,2)}V_{21}(2,0), \quad (\text{C.3a})$$

$$V_{22}(2,0) = \frac{V_{11}(1,2)}{V_{11}(1,0)} + \frac{V_{12}(1,0)}{V_{11}(1,0)}V_{21}(2,0), \quad (\text{C.3b})$$

$$V_{12}(2,0) = \frac{V_{12}(1,0)}{V_{11}(1,2)} - \frac{V_{12}(1,2)}{V_{11}(1,0)} - \frac{V_{12}(1,0)V_{12}(1,2)}{V_{11}(1,0)V_{11}(1,2)}V_{21}(2,0). \quad (\text{C.3c})$$

La figure C.1 montre qu'il existe un chemin dissipatif allant de ζ_2 à ζ_1 et de ζ_0 à ζ_1 . Alors tenant compte de l'équation (4.72) et en utilisant le fait que

$$\Im(\delta(\zeta_0)) = \Im(\delta(\zeta_2)) = \Im(\delta(z_0)), \quad (\text{C.4})$$

nous obtenons

$$V_{11}(1,0) = V_{11}(1,2) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon), \quad (\text{C.5a})$$

$$V_{12}(1,0) = V_{12}(1,2) = \mathcal{O}(\epsilon). \quad (\text{C.5b})$$

En prenant en compte les équations (C3), on conclut

$$V_{11}(2,0) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon)V_{21}(2,0), \quad (\text{C.6a})$$

$$V_{22}(2,0) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon)V_{21}(2,0), \quad (\text{C.6b})$$

$$V_{12}(2,0) = \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2)V_{21}(2,0). \quad (\text{C.6c})$$

Maintenant afin de calculer l'élément de matrice $V_{21}(2,0)$, on utilise la relation

$$V(\zeta_3, \zeta_2)V(\zeta_2, \zeta_0)V(\zeta_0, \zeta_6) = V(\zeta_3, \zeta_4)V(\zeta_4, \zeta_6), \quad (\text{C.7})$$

et tenant compte du résultat (4.76), on obtient

$$\begin{aligned} & V_{21}(3,2)V_{11}(2,0)e^{i\theta - (0|\eta_0)} + V_{22}(3,2)V_{21}(2,0)e^{i\theta - (0|\eta_0)} \\ &= V_{21}(3,4)V_{12}(4,6) + V_{22}(3,4)V_{22}(4,6), \end{aligned} \quad (\text{C.8a})$$

$$\begin{aligned} & V_{21}(3,2)V_{12}(2,0)e^{i\theta + (0|\eta_0)} + V_{22}(3,2)V_{22}(2,0)e^{i\theta + (0|\eta_0)} \\ &= V_{21}(3,4)V_{11}(4,6) + V_{22}(3,4)V_{21}(4,6). \end{aligned} \quad (\text{C.8b})$$

Les deux chemins allant de ζ_4 à ζ_3 et de ζ_2 à ζ_3 sont anti-dissipatifs comme le montre la figure C.1. Nous pouvons donc utiliser l'équation (4.70) pour calculer les éléments de matrice $V(\zeta_3, \zeta_4)$ et $V(\zeta_3, \zeta_2)$:

$$V_{21}(3,2) = \mathcal{O}(\epsilon), \quad V_{22}(3,2) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon), \quad (\text{C.9a})$$

$$V_{21}(3,4) = \mathcal{O}(\epsilon), \quad V_{22}(3,4) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (\text{C.9b})$$

Nous avons aussi obtenu les mêmes types de relation pour $V(6,4)$:

$$V_{11}(6,4) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon)V_{21}(6,4), \quad (\text{C.10a})$$

$$V_{22}(6,4) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon)V_{21}(6,4), \quad (\text{C.10b})$$

$$V_{12}(6,4) = \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon^2)V_{21}(6,4). \quad (\text{C.10c})$$

Insérant maintenant (C9) dans (C8), et en utilisant $V(4,6) = V^{-1}(6,4)$ et (C10), on obtient

$$V_{21}(2,0) = e^{-i\theta_-(0|\eta_0)} + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon)V_{21}(6,4), \quad (\text{C.11a})$$

$$V_{21}(6,4) = e^{-i\theta_+(0|\eta_0)} + \mathcal{O}(\epsilon) + \mathcal{O}(\epsilon)V_{21}(2,0). \quad (\text{C.11b})$$

En combinant ces deux derniers résultats on conclut

$$V_{21}(2,0) = e^{-i\theta_-(0|\eta_0)} + \mathcal{O}(\epsilon), \quad (\text{C.12})$$

ce qui donne finalement

$$V(\zeta_2, \zeta_0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ e^{-i\theta_-(0|\eta_0)} & 1 \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (\text{C.13})$$

Annexe D

Formule pour $\theta_{\pm}(0|\eta_0)$

Dans cet appendice, nous allons établir une formule explicite pour $\theta_{\pm}(0|\eta_0)$. Considérons tout d'abord les vecteurs propres normalisés associés à l'Hamiltonien $H(z)$

$$\begin{aligned} |\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{(B_3(z) \pm \sqrt{\rho(z)})^2 + (B_1(z) + iB_2(z))^2}} \\ &\quad \times [B_3(z) \pm \sqrt{\rho(z)}, B_1(z) + iB_2(z)]^t \\ \langle \varphi_{\pm}^{(L)}(z)| &= \frac{1}{\sqrt{(B_3(z) \pm \sqrt{\rho(z)})^2 + (B_1(z) + iB_2(z))^2}} \\ &\quad \times [B_3(z) \pm \sqrt{\rho(z)}, B_1(z) + iB_2(z)] \end{aligned} \quad (D.1)$$

où les quantités $B_k(z), k = 1, 2, 3$ sont définies par l'équation (4.4). Les valeurs propres de $H(z)$ s'écrivent

$$\lambda_{\pm}(z) = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\rho(z)}. \quad (D.2)$$

Nous notons par $|\varphi_{\pm}^{(R)}(0|\eta_0)\rangle$ le résultat du prolongement analytique de $|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle$ obtenu au point 0 après une révolution le long du contour fermé η_0 basé à l'origine et entourant le point de transition z_0 . Vu que z_0 est un point de branchement pour la fonction $\sqrt{\rho(z)}$, la racine carrée dans (D1) change de signe et donc les vecteurs propres changent leurs étiquettes à la fin de la boucle η_0 . On obtient donc

$$\begin{aligned} |\varphi_{\pm}^{(R)}(0|\eta_0)\rangle &= |\varphi_{\mp}^{(R)}(0)\rangle, \\ \langle \varphi_{\pm}^{(L)}(0|\eta_0)| &= \langle \varphi_{\mp}^{(L)}(0)|. \end{aligned} \quad (D.3)$$

Nous introduisons maintenant la nouvelle phase $\chi_{\pm}(z)$ qui est analytique au voisinage du point origine par la relation

$$|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle = e^{i\chi_{\pm}(z)} |\zeta_{\pm}^{(R)}(z)\rangle \quad (D.4)$$

avec la condition initiale

$$e^{i\chi_{\pm}(0)} = 1. \quad (D.5)$$

Appliquant maintenant le projecteur $P_{\pm}(z) = |\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle \langle \varphi_{\pm}^{(L)}(z)|$ à

$$|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle' = i\chi'_{\pm}(z) |\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle + e^{i\chi_{\pm}(z)} |\zeta_{\pm}^{(R)}(z)\rangle', \quad (D.6)$$

nous obtenons

$$P_{\pm}(z)|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle' = i\chi'_{\pm}(z)|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle. \quad (\text{D.7})$$

En multipliant l'équation (D7) par $\langle\varphi_{\pm}^{(L)}(z)|$, on obtient

$$i\chi'_{\pm}(z) = \langle\varphi_{\pm}^{(L)}(z)|P_{\pm}(z)|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle'. \quad (\text{D.8})$$

Nous considérons maintenant la relation

$$|\varsigma_{\pm}^{(R)}(0|\eta_0)\rangle = e^{-i\theta_{\pm}(0|\eta_0)}|\varsigma_{\mp}^{(R)}(0)\rangle, \quad (\text{D.9})$$

où $\theta_{\pm}(0|\eta_0)$ est une phase obtenue après avoir effectué une révolution le long du contour η_0 . En utilisant maintenant (D3) et les définitions (D4) et (D5), nous obtenons

$$\begin{aligned} |\varsigma_{\pm}^{(R)}(0|\eta_0)\rangle &= e^{-i\theta_{\pm}(0|\eta_0)}|\varsigma_{\mp}^{(R)}(0)\rangle \\ &= e^{-i\chi_{\pm}(0|\eta_0)}|\varphi_{\pm}^{(R)}(0|\eta_0)\rangle \\ &= e^{-i\chi_{\pm}(0|\eta_0)}|\varphi_{\mp}^{(R)}(0)\rangle \\ &= e^{-i\chi_{\pm}(0|\eta_0)}|\varsigma_{\mp}^{(R)}(0)\rangle \\ &= \exp\left[-i\int_{\eta_0} dz \langle\varphi_{\pm}^{(L)}(z)|P_{\pm}(z)|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle'\right] \times |\varsigma_{\mp}^{(R)}(0)\rangle. \end{aligned}$$

Identifiant (C10) avec (C9), on conclut

$$e^{-i\theta_{\pm}(0|\eta_0)} = \exp\left[-i\int_{\eta_0} dz \langle\varphi_{\pm}^{(L)}(z)|P_{\pm}(z)|\varphi_{\pm}^{(R)}(z)\rangle'\right]. \quad (\text{D.10})$$

Finalement, il reste à insérer les formules explicites (D1) dans l'équation (D11) pour obtenir l'expression des phases θ_{\pm} en fonction des paramètres $B_j(z), j = 1, 2, 3$:

$$e^{-i\theta_{\pm}(0|\eta_0)} = e^{ik\pi} e^{\pm i \int_{\eta_0} \frac{B_3(z)(B_1(z)B_2'(z) - B_2(z)B_1'(z))}{2\sqrt{\rho(z)(B_1^2 + B_2^2)}} dz}. \quad (\text{D.11})$$

Chapitre 5

Passage adiabatique pour les systèmes quantiques dissipatifs à deux niveaux : Formulation, processus superadiabatique et topologie

5.1 Introduction

DANS ce chapitre, nous considérons des modèles à deux niveaux qui traitent des systèmes ouverts et permettent la prise en compte des différents effets décohérents dus à l'environnement extérieur [71–73]. L'application du principe adiabatique à ces systèmes est une question non triviale. En effet, ces systèmes sont décrits par des opérateurs non-hermitiens qui ne sont pas nécessairement diagonalisables [75, 76] et conduisent en général à des valeurs propres complexes [9, 44, 74].

Toutefois, les matrices non diagonalisables conduisent dans la situation la plus générale à des blocs de Jordan qui jouent le rôle des sous-espaces propres dans l'approximation adiabatique [76]. Ceci a été rigoureusement démontré dans la Ref. [77] en utilisant la technique superadiabatique qui permet de minimiser les transitions entre les blocs de Jordan dans la limite adiabatique.

Le principal obstacle à la formulation d'une approximation adiabatique est lié à l'apparition des valeurs propres complexes. En effet, il est connu qu'un théorème adiabatique sous sa forme standard, autrement dit la formulation qui permet de décrire la dynamique du système en suivant un seul état, n'existe en général que lorsque la dynamique suit l'état le moins dissipatif [9, 44]. Dans l'autre cas, lorsque la dynamique suit l'état le plus dissipatif, seule une faible dissipation permet d'établir une approximation adiabatique consistente. Une dissipation est dite faible si elle vérifie la condition $\Gamma T \ll 1$, où Γ est le taux de la dissipation et T est un temps caractéristique du système pris assez grand dans la limite adiabatique. L'inexistence d'un théorème adiabatique lorsque cette condition n'est pas satisfaite est cruciale car elle empêche, en principe, son application aux processus de transfert de population qui sont accompagnés par un croisement des parties imaginaires des valeurs propres. Dans le chapitre précédent, nous avons montré qu'on peut déterminer sous certaines conditions les corrections non-adiabatiques même pour un taux de dissipation qui n'est pas faible. Le but principal de ce chapitre est de formuler et d'analyser la solution générale d'un système dissipatif à deux

niveaux dans la limite adiabatique, qui est valide au delà du régime de faible dissipation sur la base des résultats établis dans le chapitre précédent. Le chapitre est organisé comme suit. Dans la section suivante, nous analysons la topologie du système : Nous classons tous les chemins possibles dans l'espace des paramètres qui aboutissent à des transferts de population à la fin de l'interaction. En particulier nous montrons qu'un transfert de population peut se produire en général si le couplage est assez grand par rapport au taux de la dissipation. Dans la section 5.3, nous formulons la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux. Nous analysons en particulier les modèles avec et sans croisement des parties imaginaires des valeurs propres. La technique superadiabatique est traitée dans la section 5.4. Cette technique nous permet d'établir l'histoire des transitions non-adiabatiques. Enfin, nous concluons dans la section 5.5.

5.2 Topologie du passage adiabatique

Afin de réaliser un transfert de population entre un état initial et un état cible par passage adiabatique, il est important de développer une image globale montrant les chemins possibles qui relient ces états. Ceci nous permet ainsi de choisir les paramètres appropriés du champ laser qui mènent au passage adiabatique désiré. Dans la suite, nous montrons comment les propriétés de connectivité entre un état initial et un état cible sont déterminées par la topologie des surfaces d'énergie en fonction des paramètres d'un champ laser externe.

Le concept de topologie des surfaces d'énergie d'un système non dissipatif a été traité dans la référence [43, 91]. Les différentes surfaces d'énergie tracées dans l'espace des paramètres¹ $(\Omega T, \Delta T)$ montrent qu'elles sont connectées les unes des autres par des interactions coniques généralement localisées au point $(\Omega = 0, \Delta = 0)$. Les positions de ces interactions déterminent l'ensemble des chemins possibles qui relient un état initial aux différents états cibles. Ainsi, deux trajectoires sont topologiquement équivalentes si on peut déformer une en l'autre sans la croiser ni quitter la surface d'énergie. *Toutes les trajectoires reliant un état initial à un état cible qui sont topologiquement dans la même classe sont équivalentes dans la limite adiabatique.* Le concept de la topologie des surfaces d'énergies est donc la clé de la robustesse du passage adiabatique dans le sens où le transfert final de population ne dépend pas des fluctuations des impulsions lasers.

Dans cette section, nous caractérisons la topologie du système, généralisant ainsi l'analyse de la référence [43] à des systèmes dissipatifs à deux niveaux. Le modèle que nous considérons dans ce chapitre est décrit par l'Hamiltonien (4.2) dans le chapitre précédent, pour lequel nous considérons un couplage réel [82, 83]

$$H(\tau) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \Omega(\tau) \\ \Omega(\tau) & 2(\Delta(\tau) - i\Gamma) \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

Les valeurs propres de l'Hamiltonien (5.1) s'écrivent alors

$$\lambda_{\pm}(\Omega, \Delta) = \frac{1}{2}(\Delta - i\Gamma) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\Delta - i\Gamma)^2 + \Omega^2} = \frac{1}{2}(\Delta - i\Gamma) \pm \frac{1}{2}\lambda. \quad (5.2)$$

1. L'espace des paramètres que nous considérons ici est un espace dont les axes sont la fréquence de Rabi Ω et l'écart à la résonance Δ .

L'Hamiltonien (5.1) est un opérateur non hermitien qui génère deux ensembles de vecteurs propres droites et gauches vérifiant

$$\langle \varphi_\alpha^L | \varphi_\beta^R \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_\alpha |\varphi_\alpha^R\rangle \langle \varphi_\alpha^L| = 1. \quad (5.3)$$

et

$$\begin{aligned} H|\varphi_\pm^{(R)}\rangle &= \lambda_\pm|\varphi_\pm^{(R)}\rangle \\ H^\dagger|\varphi_\pm^{(L)}\rangle &= \lambda_\pm^*|\varphi_\pm^{(L)}\rangle. \end{aligned} \quad (5.4)$$

Nous rappelons que ces vecteurs propres peuvent s'écrire en fonction d'un angle complexe θ défini par la relation

$$\tan \theta = \frac{\Omega}{-\Delta + i\Gamma} \quad (5.5)$$

sous la forme

$$|\varphi_+^R\rangle = [\cos(\theta/2) \quad \sin(\theta/2)]^t \quad (5.6a)$$

$$|\varphi_-^R\rangle = [-\sin(\theta/2) \quad \cos(\theta/2)]^t \quad (5.6b)$$

$$\langle \varphi_+^L| = [\cos(\theta/2) \quad \sin(\theta/2)] \quad (5.6c)$$

$$\langle \varphi_-^L| = [-\sin(\theta/2) \quad \cos(\theta/2)]. \quad (5.6d)$$

Nous avons choisi θ tel que $0 \leq \Re(\theta) < \pi$ pour Ω positive, plus précisément, $0 \leq \Re(\theta) < \pi/2$ pour Δ négatif et $\pi/2 \leq \Re(\theta) < \pi$ pour Δ positif et $\pi \leq \Re(\theta) < 2\pi$ pour Ω négatif, plus précisément, $\pi \leq \Re(\theta) < 3\pi/2$ pour Δ positif et $3\pi/2 \leq \Re(\theta) < 2\pi$ pour Δ négatif (voir l'annexe D du chapitre 3). Dans cette analyse topologique, nous supposons que le système subit une évolution adiabatique idéale (*i.e.* nous ne considérons pas les transitions non adiabatiques).

La figure 5.2 montre les parties réelles et imaginaires des surfaces d'énergie tracées en fonction des paramètres Ω et Δ pour $\Omega \geq 0$. Pour $\Omega < 0$, la figure est symétrique à celle de 5.2. L'Hamiltonien du système n'est pas diagonalisable aux points $(\Delta = 0, \Omega = \pm\Gamma)$ qui correspondent à deux points de branchement pour la fonction λ , appelés encore des points exceptionnels [62–69]. On peut voir clairement le point singulier de coordonnées $(\Delta = 0, \Omega = +\Gamma)$ dans la figure 5.4 où nous avons tracé la valeur absolue de la fonction λ . Nous pouvons définir la branche de coupure reliant ces deux points comme $-\Gamma \leq \Omega \leq \Gamma$ dans le plan $\Delta = 0$. Toute au long de cette ligne de coupure les parties réelles des valeurs propres se croisent. Par contre les parties imaginaires se croisent uniquement pour $\Omega > \Gamma$ dans le plan $\Delta = 0$. Les conditions choisies sur l'angle complexe θ correspondent mathématiquement au feuillet de Riemann défini comme $\sqrt{a + ib} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\sqrt{a^2 + b^2} + a} + i \operatorname{sgn}(b) \sqrt{\sqrt{a^2 + b^2} - a} \right)$. Ceci mène à étiqueter les surfaces d'énergies de sorte que la partie supérieure associée à la partie réelle correspond à la surface d'énergie λ_+ et la partie inférieure est associée à la surface d'énergie λ_- (voir la discussion sur l'étiquetage des surfaces d'énergie dans la Réf. [92]). Nous remarquons ainsi qu'un tel étiquetage implique une discontinuité dans la partie imaginaire des valeurs propres quand on traverse la ligne de coupure (voir figure 5.1). Nous n'avons pas montré explicitement cette discontinuité dans la figure 5.2 vu qu'elle ne correspond pas à la dynamique adiabatique du système (voir la discussion plus bas). Dans cette figure, l'état $|1\rangle$ correspond à la ligne horizontale d'énergie 0 dans le plan $\Omega = 0$, et l'état $|2\rangle$ correspond à la ligne Δ pour la partie réelle et la ligne horizontale $-i\Gamma$ pour la partie imaginaire dans le plan

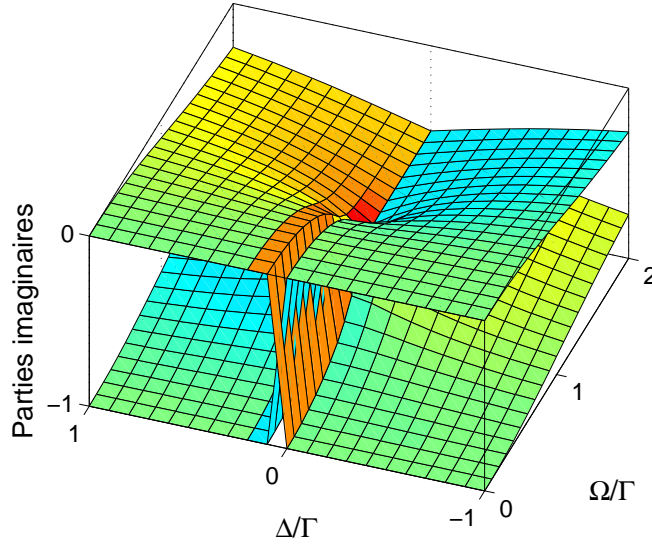


FIG. 5.1 – Parties imaginaires des surfaces d'énergie (en unité de Γ) associée à l'Hamiltonien (5.1) en fonction des paramètres Ω/Γ et Δ/Γ . On voit explicitement la discontinuité des parties imaginaires lorsque $\Omega < \Gamma$.

$\Omega = 0$.

L'analyse des surfaces d'énergie nous permet de sélectionner les différentes trajectoires permettant un transfert de population à la fin de l'interaction dans la limite adiabatique. En effet, quand la trajectoire est telle que $\Omega_0 < \Gamma$, autrement dit quand la trajectoire n'entoure pas la singularité, la dynamique traverse la ligne de coupure et passe de la surface d'énergie λ_+ vers la surface d'énergie λ_- . Pour ce type de trajectoire, il peut être judicieux de changer l'étiquetage des surfaces d'énergie de sorte que la dynamique suit la même surface. Ceci revient alors à définir la racine carrée comme $\sqrt{a + ib} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\text{sgn}(b) \sqrt{\sqrt{a^2 + b^2} + a} + i \sqrt{\sqrt{a^2 + b^2} - a} \right)$. Ceci signifie physiquement une absence de transition à la fin de l'interaction. Une telle dynamique est représentée par le chemin (a) dans la figure 5.2. Notons que ce saut n'apparaît pas sur les parties imaginaires des surfaces d'énergies vu qu'on a artificiellement effacé la discontinuité. Le chemin (a) suit alors continûment la surface.

Quand maintenant la trajectoire est telle que $\Omega_0 > \Gamma$, plus précisément quand on entoure la singularité (voir la trajectoire (b) par exemple), la dynamique correspond alors à une transition de l'état $|1\rangle$ vers l'état $|2\rangle$ à la fin de l'interaction. Nous remarquons ainsi qu'une telle dynamique est accompagnée par *un croisement des parties imaginaires des valeurs propres* quand $\Delta = 0$. La figure 5.2 montre aussi une trajectoire notée (c) comme une boucle qui entoure la singularité dans l'espace des paramètres et qui mène à un transfert de population. Si nous considérons aussi les surfaces d'énergie pour $\Omega < 0$, nous pouvons caractériser une trajectoire qui entoure les deux singularités à la fois et qui mène à une absence de transition à la fin de l'interaction (voir figure 5.4).

D'un point de vue topologique, l'analyse des surfaces d'énergie nous a montré qu'un trans-

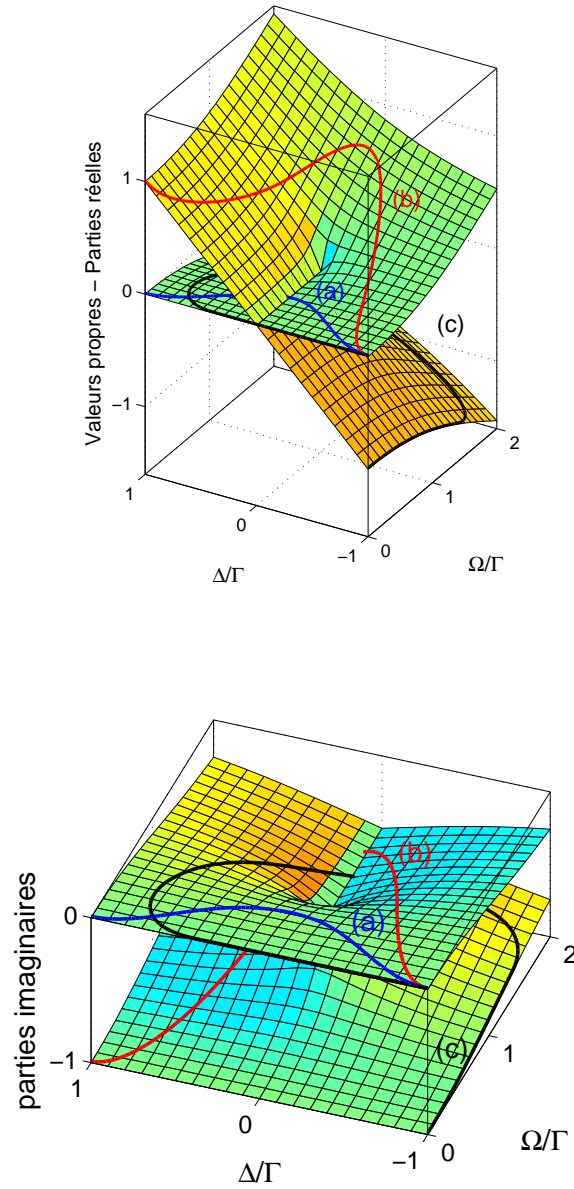


FIG. 5.2 – Parties réelles et imaginaires des surfaces d'énergies (en unité de Γ) associées à l'Hamiltonien (5.1) en fonction des paramètres Ω/Γ et Δ/Γ . La figure montre deux trajectoires (b) et (c) qui entourent la singularité localisée au point $\Omega = \Gamma$ et $\Delta = 0$ et qui mènent à un transfert de population à la fin de l'interaction et une troisième trajectoire (a) qui traverse la branche de coupure. Notons que la discontinuité non physique des parties imaginaires des surfaces d'énergies qui se localise pour $\Delta = 0$, $\Omega < \Gamma$ a été artificiellement effacée. Ainsi la trajectoire (a) suit continuellement la surface d'énergie.

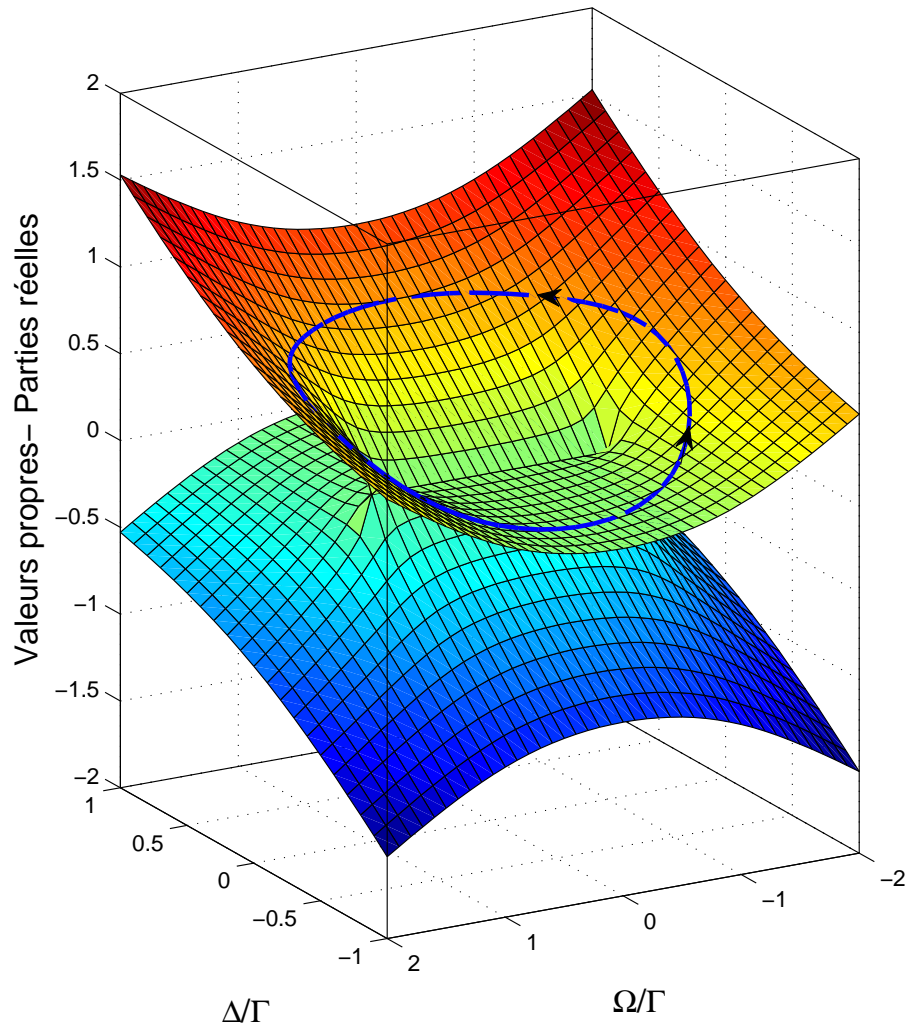


FIG. 5.3 – Parties réelles des surfaces d'énergie (en unité de Γ) associée à l'Hamiltonien (5.1) en fonction des paramètres Ω/Γ et Δ/Γ . La figure montre une trajectoire en bleue qui encercle les deux singularités localisées aux points $\Omega = \pm\Gamma$ et $\Delta = 0$ et qui mène à une absence de transition à la fin de l'interaction.

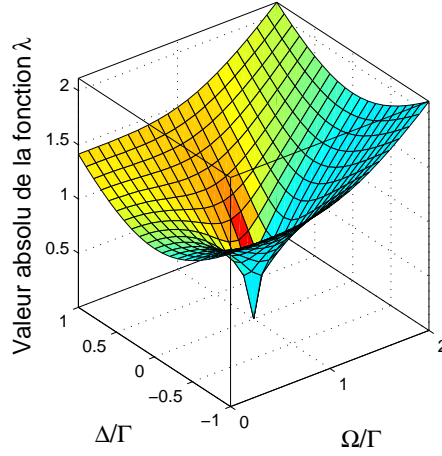


FIG. 5.4 – Valeur absolue de la différence d'énergies λ (en unité de Γ) associée à l'Hamiltonien (5.1) en fonction des paramètres Ω/Γ et Δ/Γ . La singularité est localisée au point $\Omega = \Gamma$ et $\Delta = 0$.

fert de population est possible en général quand la dynamique du système entoure la singularité dans l'espace des paramètres. Ceci nécessite alors un couplage assez grand par rapport à la dissipation *i.e.*

$$\Omega > \Gamma. \quad (5.7)$$

D'un point de vue dynamique, si l'on considère les transitions non adiabatiques, il faut aussi s'assurer que la trajectoire passe suffisamment loin de la singularité pour que la dynamique soit assez lente.

5.3 Passage adiabatique et l'analyse superadiabatique

Dans la limite adiabatique lorsque T tend vers l'infini, on pourrait s'attendre à l'existence d'un théorème adiabatique standard vu que le terme du couplage non adiabatique est petit par rapport à la différence entre les valeurs propres du système

$$\frac{|\gamma|}{T|\lambda_+ - \lambda_-|} \rightarrow 0. \quad (5.8)$$

Ceci est en effet vrai pour les systèmes conservatifs mais pas en général pour les systèmes dissipatifs. En effet, il est connu qu'un tel théorème existe uniquement quand la dynamique du système suit le vecteur propre le moins dissipatif [9, 44], autrement dit le vecteur propre qui est associé à la valeur propre dont la partie imaginaire est la plus grande. Dans le cas contraire, quand le système est initialement connecté au vecteur propre le plus dissipatif (*i.e.* le vecteur propre qui est associé à la valeur propre dont la partie imaginaire est la plus petite), alors uniquement une faible dissipation définie comme $\Gamma T \ll 1$ permet de préserver l'existence du théorème adiabatique.

Dans ce chapitre, nous formulons la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux

dans la limite adiabatique qui est valable au delà du régime de faible dissipation. Plus précisément, si nous notons respectivement $|\varphi_j\rangle$ et λ_j ($j=1,2$), les vecteurs et valeurs propres instantanés du système et si nous supposons de plus que le système est initialement connecté à l'état $|\varphi_1\rangle$: $|\phi(-\infty)\rangle = |\varphi_1(-\infty)\rangle$ alors à la fin de l'interaction (i.e $\tau \rightarrow +\infty$) et dans la limite adiabatique (i.e $T \rightarrow +\infty$), la solution générale du système peut s'écrire sous la forme

$$|\phi(\tau)\rangle = a_1(\tau)e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_1(\tau') d\tau'} |\varphi_1(\tau)\rangle + c_T(\tau)e^{-iT[\int_{-\infty}^0 \lambda_1(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_2(\tau') d\tau']} |\varphi_2(\tau)\rangle \quad (5.9)$$

avec

$$a_1(+\infty) = 1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right) \quad (5.10)$$

et

$$c_T(+\infty) = \mathcal{O}\left(e^{-|const|\times T}\right). \quad (5.11)$$

Le vecteur propre $|\varphi_1\rangle$ correspond ici à l'état adiabatique qui devrait être suivi au cours de la dynamique. L'équation (5.9) peut être donc considérée comme étant l'approximation adiabatique généralisée pour les systèmes dissipatifs à deux niveaux. Ceci est le principal résultat de ce chapitre.

Afin de discuter l'approximation (5.9), nous écrivons d'abord la fonction d'onde du système dans la base adiabatique $\{|\varphi_+(\tau)\rangle, |\varphi_-(\tau)\rangle\}$ sous la forme

$$|\phi(\tau)\rangle = \sum_{j=\pm} b_j(\tau) |\varphi_j(\tau)\rangle, \quad (5.12)$$

où les coefficients b_j peuvent se décomposer en

$$b_j(\tau) = a_j(\tau) e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_j(\tau') d\tau'}. \quad (5.13)$$

En substitution (5.12) dans l'équation de Schrödinger

$$i\epsilon \partial_{\tau} |\phi(\tau)\rangle = H(\tau) |\phi(\tau)\rangle, \quad \epsilon = \frac{1}{T}, \quad (5.14)$$

les coefficients a_j vérifient les équations différentielles

$$\partial_{\tau} a_+(\tau) = \gamma(\tau) e^{-\frac{i}{\epsilon} \delta(\tau)} a_-(\tau), \quad (5.15a)$$

$$\partial_{\tau} a_-(\tau) = -\gamma(\tau) e^{\frac{i}{\epsilon} \delta(\tau)} a_+(\tau), \quad (5.15b)$$

où la fonction δ est définie par

$$\delta(\tau) = \int_{-\infty}^{\tau} [\lambda_-(\tau') - \lambda_+(\tau')] d\tau' = \int_{-\infty}^{\tau} -\sqrt{\rho(\tau')} d\tau', \quad (5.16)$$

et γ est le couplage non-adiabatique défini par

$$\gamma(\tau) = \frac{\partial_{\tau} \theta}{2} = \frac{1}{2} \frac{\partial_{\tau} \Delta(\tau) \Omega(\tau) - \partial_{\tau} \Omega(\tau) \Delta(\tau)}{(\lambda_- - \lambda_+)^2}. \quad (5.17)$$

Dans la suite, nous allons discuter l'approximation (5.9) pour les deux modèles *sans et avec croisement* d'énergies. Nous allons analyser pour chaque modèle le cas où le système est initialement connecté respectivement à la valeur propre la moins dissipative et la plus dissipative.

5.3.1 Modèle sans croisement d'énergies

Nous rappelons que le modèle sans croisement d'énergie correspond à la situation où les parties imaginaires des valeurs propres ne se croisent pas au cours du temps. En particulier, on peut considérer qu'à chaque instant

$$\Im[\lambda_-(\tau)] < \Im[\lambda_+(\tau)] \quad \forall \tau. \quad (5.18)$$

Une telle situation est possible quand l'écart à la résonance est négatif à chaque instant *i.e.* $\Delta(\tau) = -\Delta_0 < 0$ (voir section 4.1.3 du chapitre précédent). On dit alors que le vecteur propre $|\varphi_-(\tau)\rangle$ est plus dissipatif que $|\varphi_+(\tau)\rangle$.

Connexion au vecteur propre le moins dissipatif

Nous considérons ici le cas où le système est initialement connecté à l'état $|+\rangle$: $|\phi(-\infty)\rangle = |\varphi_+(-\infty)\rangle = |1\rangle$, ce qui correspond à $a_+(-\infty) = b_+(-\infty) = 1$ et $a_-(-\infty) = b_-(-\infty) = 0$.

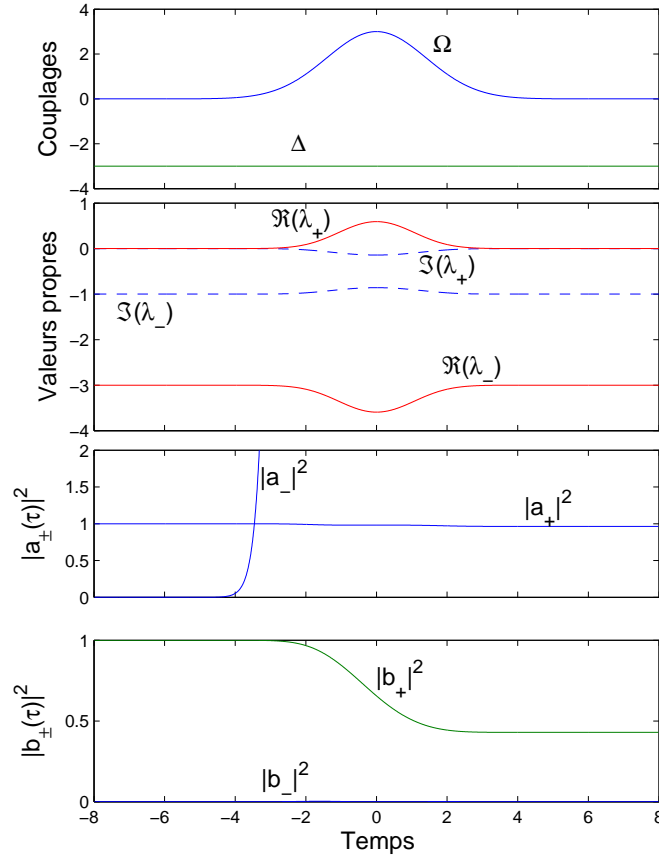


FIG. 5.5 – Dynamique adiabatique d'un modèle sans croisement d'énergies dont le système est initialement connecté au vecteur propre le moins dissipatif $|\varphi_+\rangle$. Les couplages que nous avons utilisé sont de la forme : $\Omega(\tau) = \Omega_0 e^{-\tau^2}$ pour la fréquence de Rabi et $\Delta = -\Delta_0 < 0$ pour l'écart à la résonance avec $\Omega_0 T = 6$, $\Delta_0 T = 6$ et $\Gamma T = 1$. La figure montre que le coefficient a_- diverge exponentiellement dans la limite adiabatique, en revanche le coefficient $|b_-(\tau)|^2 \ll |b_+(\tau)|^2$ tout au long de la dynamique. Un théorème adiabatique standard peut être donc appliqué lorsque le système se connecte au vecteur propre le moins dissipatif.

Ceci mène donc à un suivi adiabatique le long du vecteur propre le moins dissipatif $|\varphi_+(\tau)\rangle$. Tenant compte de ces connexions initiales, on peut écrire les équations (5.15) sous la forme

$$a_+(\tau) = 1 + \int_{-\infty}^{\tau} \gamma(\tau') e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau')} a_-(\tau') d\tau' \quad (5.19a)$$

$$a_-(\tau) = - \int_{-\infty}^{\tau} \gamma(\tau') e^{\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau')} a_+(\tau') d\tau'. \quad (5.19b)$$

Dans la suite, nous allons estimer ces coefficients dans la limite adiabatiques par un calcul sur l'axe réel. Nous utilisons en particulier la technique développée dans le chapitre précédent. Nous commençons d'abord par effectuer une integration par parties dans l'équation (5.19a). Soit

$$\begin{aligned} a_+(\tau) &= 1 + \frac{\epsilon}{i} \frac{\gamma(\tau)}{\delta'(\tau)} e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(\tau) - \frac{\epsilon}{i} \int_{-\infty}^{\tau} \left(\frac{\gamma(u)}{\delta'(u)} \right)' e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(u)} a_-(u) du \\ &\quad + \frac{\epsilon}{i} \int_{-\infty}^{\tau} \left(\frac{\gamma^2(u)}{\delta'(u)} \right) a_+(u) du, \end{aligned} \quad (5.20)$$

où la notation ' désigne la dérivée par rapport à la variable u . D'après l'équation (5.19b), on peut écrire

$$\begin{aligned} |a_-(\tau)| &\leq \int_{-\infty}^{\tau} |\gamma(\tau')| e^{-\frac{\Im[\delta(\tau')]}{\epsilon}} |a_+(\tau')| d\tau' \\ &\leq e^{-\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} \int_{-\infty}^{\tau} |\gamma(\tau')| e^{\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon} - \frac{\Im[\delta(\tau')]}{\epsilon}} |a_+(\tau')| d\tau'. \end{aligned} \quad (5.21)$$

La condition (5.18) implique que la fonction $\Im[\delta]$ est strictement décroissante sur l'axe réel. En effet,

$$\Im[\lambda_-] < \Im[\lambda_+] \Leftrightarrow \frac{d}{d\tau} \Im[\delta(\tau)] < 0. \quad (5.22)$$

Le terme $|a_-(\tau)|$ peut être donc majoré par

$$|a_-(\tau)| \leq \|a_+\| e^{-\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} |\gamma(\tau')| d\tau' \quad (5.23)$$

où $\|a_+\| = \sup_{-\infty < \tau' \leq \tau} |a_+(\tau')|$. D'autre part, l'équation (5.20) donne

$$\begin{aligned} |a_+(\tau)| &\leq 1 + \epsilon \left| \frac{\gamma(\tau)}{\delta'(\tau)} e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(\tau) \right| + \epsilon \left| \int_{-\infty}^{\tau} \left(\frac{\gamma(u)}{\delta'(u)} \right)' e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(u)} a_-(u) du \right| \\ &\quad + \epsilon \left| \int_{-\infty}^{\tau} \left(\frac{\gamma^2(u)}{\delta'(u)} \right) a_+(u) du \right|. \end{aligned} \quad (5.24)$$

En insérant maintenant l'inégalité (5.23) dans l'équation (5.24) on obtient

$$|a_+(\tau)| \leq 1 + \epsilon \|a_+\| K, \quad (5.25)$$

où K est une constante positive. Prenons le sup pour $-\infty < \tau < +\infty$, on obtient

$$\|a_+\| \leq \frac{1}{1 - \epsilon K}. \quad (5.26)$$

On conclut alors que dans la limite adiabatique

$$a_+(\tau) \simeq 1 + \mathcal{O}(\epsilon) \quad \forall \tau. \quad (5.27)$$

Finalement, tenant compte de l'équation (5.23), on conclut alors que

$$\begin{aligned} |a_-(\tau)| &\leq (1 + \mathcal{O}(\epsilon)) e^{-\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} \int_{-\infty}^{+\infty} |\gamma(\tau')| d\tau' \\ &\leq (1 + \mathcal{O}(\epsilon)) e^{-\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} k, \end{aligned} \quad (5.28)$$

où k est une autre constante positive. Toutefois, l'équation (5.28) ne nous permet pas de donner une estimation du coefficient a_- dans la limite adiabatique vu que le terme $e^{-\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}}$ diverge exponentiellement lorsque $\epsilon \rightarrow 0$. En effet, le calcul numérique (cf. Fig. 5.3) confirme que le coefficient a_- diverge dans la limite adiabatique comme

$$a_-(\tau) = \mathcal{O}(\epsilon e^{-\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}}). \quad (5.29)$$

En tenant compte maintenant des coefficients b_{\pm} , il est alors facile de voir que le rapport

$$\left| \frac{b_-(\tau)}{b_+(\tau)} \right| = \mathcal{O}(e^{T\Im[\delta(\tau)]}), \quad (5.30)$$

ce qui implique que dans la limite adiabatique le coefficient $|b_-(\tau)| \ll |b_+(\tau)|$. Ceci est principalement dû à la forte dissipation du terme $e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_-(\tau') d\tau'}$ en face du coefficient a_- . L'approximation adiabatique standard peut être donc appliquée lorsque le système se connecte initialement à la valeur propre la moins dissipative:

$$|\phi(\tau)\rangle \simeq e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_+(\tau') d\tau'} |\varphi_+(\tau)\rangle. \quad (5.31)$$

Plus précisément, l'usage de la technique des lignes de Stokes et les points de transitions dans le plan complexe nous a permis de calculer le coefficient a_- à la fin de l'interaction (i.e $\tau \mapsto +\infty$). Dans la limite adiabatique, nous avons obtenu

$$a_-(+\infty) = e^{\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 [\lambda_-(\tau) - \lambda_+(\tau)] d\tau} c_T(+\infty) \quad (5.32)$$

où $c_T(+\infty)$ est donné par

$$c_T(+\infty) = \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_j} e^{iT\delta_0(z_j)} + \mathcal{O}(\epsilon e^{-T\Im[\delta(z_0)]}) \quad (5.33)$$

et

$$\delta_0(z) = \int_0^z [\lambda_-(\tau) - \lambda_+(\tau)] d\tau, \quad (5.34)$$

où les N points de transitions z_j se localisent sur la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel dans le plan complexe inférieur défini comme

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1, N-1})] > 0 \quad (5.35)$$

et θ_j est une phase géométrique [38, 39, 45, 46, 93]. La ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel correspond ici à celle qui donne la plus petite valeur de $\Im[\delta_0(z_0)]$ (en valeur absolu) ce qui correspond donc à la plus grande contribution. En tenant compte des résultats établis précédemment [équations (5.27), (5.32) et (5.33)], la fonction d'onde s'écrit ainsi à la fin de l'interaction

$$|\phi(\tau)\rangle \simeq e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_+(\tau') d\tau'} |\varphi_+(\tau)\rangle + c_T(\tau) e^{-iT[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_-(\tau') d\tau']} |\varphi_-(\tau)\rangle \quad (5.36)$$

Ceci est l'approximation (5.9) avec l'étiquetage $1 \leftrightarrow +$ et $2 \leftrightarrow -$ pour les valeurs et les vecteurs propres.

Connexion au vecteur propre le plus dissipatif

Dans le cas contraire lorsque le système est initialement connecté au vecteur propre le plus dissipatif: $|\phi(-\infty)\rangle=|\varphi_-(-\infty)\rangle=|2\rangle$ et qui correspond aux conditions initiales $a_+(-\infty) = b_+(-\infty) = 0$ et $a_-(-\infty) = b_-(-\infty) = 1$, nous ne pouvons plus appliquer l'approximation adiabatique standard dans le sens où la fonction d'onde du système suit le seul état $|\varphi_-(\tau)\rangle$ tout au long de la dynamique. En effet, l'intégration par partie de l'équation (5.19b) donne

$$a_-(\tau) = 1 + \frac{\epsilon}{i} \frac{\gamma(\tau)}{\delta'(\tau)} e^{\frac{i}{\epsilon} \delta(\tau)} a_+(\tau) - \frac{\epsilon}{i} \int_{-\infty}^{\tau} \left(\frac{\gamma(u)}{\delta'(u)} \right)' e^{\frac{i}{\epsilon} \delta(u)} a_+(u) du - \frac{\epsilon}{i} \int_{-\infty}^{\tau} \left(\frac{\gamma^2(u)}{\delta'(u)} \right) a_-(u) du. \quad (5.37)$$

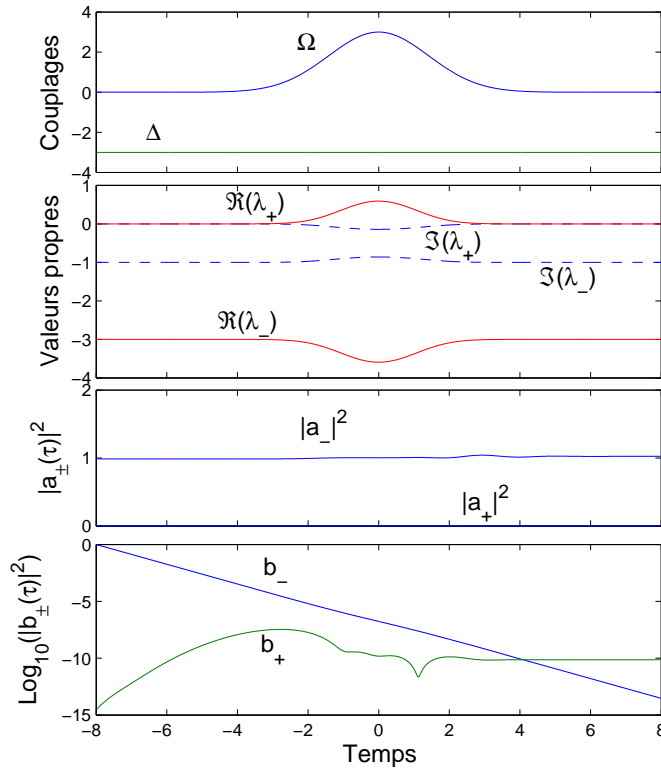


FIG. 5.6 – Dynamique adiabatique d'un modèle sans croisement d'énergies dont le système est initialement connecté au vecteur propre le plus dissipatif $|\varphi_- \rangle$. Les couplages que nous avons utilisé sont de la forme: $\Omega(\tau) = \Omega_0 e^{-\tau^2}$ pour la fréquence de Rabi et $\Delta = -\Delta_0 < 0$ pour l'écart à la résonance avec $\Omega_0 T = 6$, $\Delta_0 T = -6$ et $\Gamma T = 1$. La figure montre que le coefficient a_+ est pratiquement nul dans la limite adiabatique. Par contre, si on tient compte des coefficients b_{\pm} , on peut remarquer alors que $|b_-(\tau)|$ est beaucoup plus grand que $|b_+(\tau)|$ dans un premiers temps, le croise à un moment seuil, avant de devenir exponentiellement plus petit. Ce comportement caractérise le fait que le théorème adiabatique standard n'est plus valable lorsque le système se connecte initialement au vecteur propre le plus dissipatif.

D'autre part, le coefficient a_+ vérifie

$$\begin{aligned} |a_+(\tau)| &\leq \int_{-\infty}^{\tau} |\gamma(\tau')| \left| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau')} a_-(\tau') \right| d\tau' \\ &\leq \left\| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta} a_- \right\| \int_{-\infty}^{\tau} |\gamma(\tau')| d\tau' \\ &\leq \left\| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta} a_- \right\| k, \end{aligned} \quad (5.38)$$

où k est une constante positive. Multipliant maintenant les deux membres de l'équation (5.37) par $e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta}$ et en prenant la valeur absolue on obtient

$$\begin{aligned} \left| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(\tau) \right| &\leq e^{\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} + \epsilon \left| \frac{\gamma(\tau) a_+(\tau)}{\delta'(\tau)} \right| + \epsilon \int_{\infty}^{\tau} \left| \left(\frac{\gamma(u)}{\delta'(u)} \right)' \right| e^{-\frac{\Im[\delta(u)-\delta(\tau)]}{\epsilon}} |a_+(u)| du \\ &\quad + \epsilon \int_{-\infty}^{\tau} \left| \left(\frac{\gamma^2(u)}{\delta'(u)} \right)' \right| \left| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(u) \right| du. \end{aligned} \quad (5.39)$$

En insérant l'équation (5.38) dans (5.39) et en tenant compte du fait que la fonction $\Im[\delta(\tau)]$ est décroissante sur l'axe réel, on obtient

$$\left| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(\tau) \right| \leq e^{\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} + \epsilon C \left\| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(\tau) \right\|, \quad (5.40)$$

où C est une constante positive. Prenant le sup, on conclut alors que

$$\left\| e^{-\frac{i}{\epsilon}\delta(\tau)} a_-(\tau) \right\| \leq e^{\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} (1 + C\epsilon). \quad (5.41)$$

soit

$$\|a_-(\tau)\| \leq 1 + C\epsilon \quad (5.42)$$

et donc finalement

$$a_-(\tau) \simeq 1 + \mathcal{O}(\epsilon). \quad (5.43)$$

En tenant compte maintenant de l'équation (5.38) et du résultat (5.43), on conclut alors

$$|a_+(\tau)| \leq K e^{\frac{\Im[\delta(\tau)]}{\epsilon}} (1 + C\epsilon), \quad (5.44)$$

où K est une constante positive. L'équation (5.44) montre que le coefficient a_+ tend exponentiellement vers 0 dans la limite adiabatique. Par contre, ceci n'est pas le cas pour le coefficient b_+ . En effet, on a

$$\left| \frac{b_+(\tau)}{b_-(\tau)} \right| = \mathcal{O} \left(\epsilon e^{-T\Im[\delta(\tau)]} \right). \quad (5.45)$$

La dernière équation signifie qu'au premier temps, le coefficient $|b_-(\tau)|$ est beaucoup plus grand que $|b_+(\tau)|$, il croise ensuite cette valeur à un moment seuil, avant de devenir exponentiellement petit. Ces arguments empêchent l'usage du théorème adiabatique standard en général, le long du vecteur propre le plus dissipatif. L'absence d'un théorème adiabatique général dans ce cas est principalement due à la concurrence entre les phases dissipatives associées aux états propres du système. Toutefois, il est possible d'utiliser l'approximation adiabatique standard dans ce cas dans le régime des faibles dissipations qui correspond à la situation où

$T\Im[\delta(\tau)] \ll 1$. Ce qui implique $T\Gamma \ll 1$.

L'usage de la technique des lignes de Stokes et les points de transitions dans le plan complexe nous permet maintenant de calculer dans la limite adiabatique le coefficient $a_+(\infty)$. Soit

$$a_+(\infty) = e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 [\lambda_-(\tau) - \lambda_+(\tau)] d\tau} c_T(\infty), \quad (5.46)$$

où le coefficient $c_T(\infty)$ est donné par

$$c_T = \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_j} e^{-iT\delta_0(z_j)} + \mathcal{O}(\epsilon e^{T\Im[\delta_0(z_0)]}), \quad (5.47)$$

où les N points de transitions z_j se trouvent maintenant sur la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel dans le plan complexe supérieur vérifiant

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1, N-1})] < 0. \quad (5.48)$$

Tenant compte de ces résultats, la solution générale du système s'écrit dans la limite adiabatique et pour $\tau \rightarrow \infty$:

$$|\phi(\tau)\rangle \simeq e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_-(\tau') d\tau'} |\varphi_-(\tau)\rangle + c_T(\tau) e^{-iT [\int_{-\infty}^0 \lambda_-(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_+(\tau') d\tau']} |\varphi_+(\tau)\rangle. \quad (5.49)$$

Ceci donne l'approximation (5.9) mais avec l'étiquetage $1 \leftrightarrow -$ et $2 \leftrightarrow +$ pour les valeurs et les vecteurs propres.

Cas particulier : Couplage pair et un écart à la résonance constant

Dans le cas particulier où le couplage est pair (i.e $\Omega(-\tau) = \Omega(\tau)$) et l'écart à la résonance est constant, la phase dans l'équation (5.9) peut être simplifiée si nous considérons des temps initiaux et finaux opposés: $\tau_f = -\tau_i \mapsto +\infty$. On peut écrire alors

$$\int_{\tau_i}^0 \lambda_1(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau_f} \lambda_2(\tau') d\tau' = \frac{1}{2} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau' (\Delta - i\Gamma). \quad (5.50)$$

La solution générale dans ce cas s'écrit simplement

$$|\phi(\tau_f)\rangle = \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right) \right] e^{-iT \int_{\tau_f}^{\tau_i} \lambda_1(\tau') d\tau'} |\varphi_1(\tau_f)\rangle + c_T(\tau_f) e^{-i\frac{T}{2} \int_{\tau_f}^{\tau_i} \Delta - i\Gamma d\tau'} |\varphi_2(\tau_f)\rangle. \quad (5.51)$$

5.3.2 Modèle avec croisement d'énergies

On considère maintenant le cas où les parties imaginaires des valeurs propres du système se croisent. En particulier, elles vérifient

$$\begin{aligned} \Im(\lambda_-) &< \Im(\lambda_+) & \text{si } \tau < 0, \\ \Im(\lambda_-) &\geq \Im(\lambda_+) & \text{si } \tau \geq 0. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Contrairement au modèle précédent, la valeur propre λ_- est la plus dissipative tant que $\tau < 0$, mais elle devient la moins dissipative pour $\tau \geq 0$. Afin de décrire la dynamique adiabatique du système nous devons donc combiner les deux résultats établis précédemment.

La dynamique typique d'un modèle avec croisement d'énergies est illustrée par la Fig 5.5 où nous avons pris comme exemple le modèle Allen-Eberly dissipatif [47]. On considère d'abord

la situation où le système est initialement connecté à l'état le moins dissipatif: $|\phi(-\infty)\rangle = |1\rangle = |\varphi_+(-\infty)\rangle$. La figure montre ainsi que l'approximation adiabatique standard s'applique tant que le paramètre $\epsilon \ll 1$ et jusqu'à ce que les parties imaginaires des valeurs propres se croisent. Ce régime correspond à $a_+(\tau) \simeq 1$ et $|b_-(\tau)| \ll |b_+(\tau)|$. Durant cette partie de la dynamique et comme on s'y attendait d'après l'analyse précédente, le coefficient $|c_T(\tau)|$ commence à diverger exponentiellement.

Maintenant pour $\tau \geq 0$, la partie imaginaire de la valeur propre λ_+ devient plus petite que celle de λ_- et la dynamique du système suit alors le vecteur propre le plus dissipatif. Le point le plus important ici est que le coefficient $|c_T(\tau)|$ converge vers une valeur petite lorsque $\tau \rightarrow +\infty$ qui correspond essentiellement à la valeur de la correction non adiabatique. Par contre, le coefficient $|b_+(\tau)|$ devient exponentiellement plus petit que $|b_-(\tau)|$ dû à la forte dissipation qui accompagne le terme a_+ au cours de cette partie de la dynamique. Le théorème

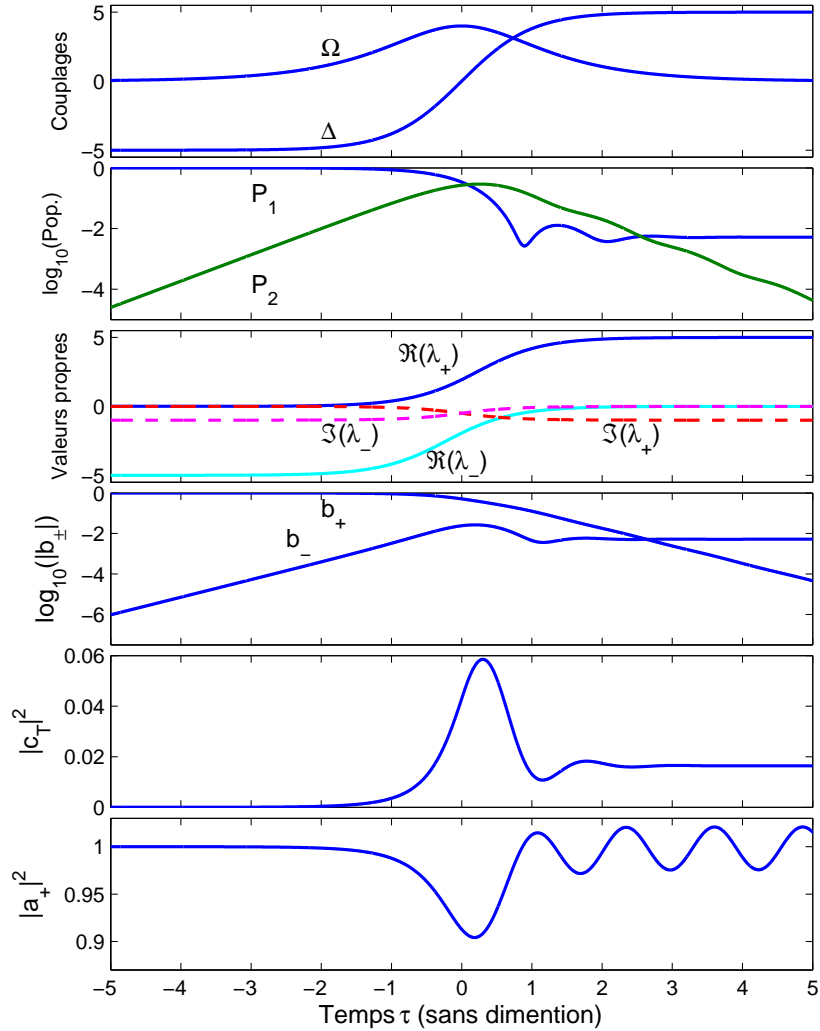


FIG. 5.7 – La dynamique adiabatique du modèle Allen-Eberly dissipatif définie par $\Omega(\tau) = \Omega_0 \text{sech}(\tau)$ et $\Delta(\tau) = \Delta_0 \tanh(\tau)$, avec $\Omega_0 T = 4$, $\Delta_0 T = 5$ et $\Gamma T = 1$. Dans cet exemple nous avons considéré le cas où le système est initialement connecté au vecteur propre le moins dissipatif $|\varphi_+\rangle$. Notons que cette dynamique correspond essentiellement à la trajectoire (b) qui entoure la singularité tracée dans la Fig 1.2.

adiabatique standard ne s'applique donc pas au voisinage et au-delà du point de croisement des coefficients $|b_+(\tau)|$ et $|b_-(\tau)|$. Nous avons remarqué cependant, que le coefficient $a_+(\tau)$ oscille mais tout en restant localisé au tour de la valeur 1. Plus particulièrement, l'usage de la technique des lignes de Stokes nous donne

$$a_+(+\infty) = 1 + O(\epsilon) \quad (5.53)$$

et

$$c_T(+\infty) = \sum_{j=0}^{N-1} e^{-i\theta_j} e^{iT\delta_0(z_j)} + O(\epsilon e^{-T\Im[\delta_0(z_0)]}) \quad (5.54)$$

où les N points de transitions z_j se localisent sur la ligne de Stokes la plus proche de l'axe réel dans le plan complexe inférieure définie comme

$$\Im[\delta_0(z)] = \Im[\delta_0(z_0)] = \Im[\delta_0(z_{j=1, N-1})] > 0. \quad (5.55)$$

Nous avons déterminé pour cet exemple, la valeur asymptotique de $|c_T|^2$ en utilisant la formule (5.54). Plus précisément, pour $\Delta_0 > \Omega_0$, on peut vérifier qu'il existe un seul point de transition sur la première ligne de Stokes. Nous avons donc obtenu $|c_T(+\infty)|^2 \approx 0.016$ qui correspond essentiellement à la valeur obtenue numériquement.

5.4 Au-delà des bases adiabatique : les bases superadiabatiques

5.4.1 Méthode itérative

Soit $R^{(0)}(\tau)$ la transformation non unitaire dont les vecteurs colonnes sont les vecteurs propres droites de l'Hamiltonien (5.1) définie par

$$R^{(0)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -\sin(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (5.56)$$

L'opérateur (5.56) diagonalise à chaque instant l'Hamiltonien (5.1)

$$[R^{(0)}]^{-1} H^{(0)} R^{(0)} = \text{diag}(\lambda_+, \lambda_-). \quad (5.57)$$

En posant

$$|\phi^{(1)}\rangle = [R^{(0)}]^{-1} |\phi^{(0)}\rangle, \quad (5.58)$$

l'équation de Schrödinger (5.14) se réécrit

$$i\epsilon \partial_\tau |\phi^{(1)}\rangle = \left[[R^{(0)}]^{-1} H^{(0)} R^{(0)} - i\epsilon [R^{(0)}]^{-1} \partial_\tau R^{(0)} \right] |\phi^{(1)}\rangle \quad (5.59a)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_+ & i\epsilon \partial_\tau \theta/2 \\ -i\epsilon \partial_\tau \theta/2 & \lambda_+ \end{pmatrix} |\phi^{(1)}\rangle. \quad (5.59b)$$

L'équation (5.59) possède la même structure mathématique que l'équation de Schrödinger originale (5.14) avec $H^{(0)} \equiv H$ remplacé par $H^{(1)}$ et la nouvelle fonction d'onde $|\phi^{(1)}\rangle$. Nous fixons de nouveau les phases des vecteurs propres orthonormés droites et gauches associés à

l'Hamiltonien $H^{(1)}$ par le transport parallèle : $\langle \varphi_j^{L(1)} | \frac{\partial}{\partial \tau} | \varphi_j^{R(1)} \rangle = 0$, ($j = \pm$). La représentation matricielle de l'opérateur $R^{(1)}$ diagonalisant à chaque instant l'Hamiltonien $H^{(1)}$

$$[R^{(1)}]^{-1} H^{(1)} R^{(1)} = \text{diag}(\lambda_+^{(1)}, \lambda_-^{(1)}) \quad (5.60)$$

a pour vecteurs colonnes les vecteurs droits $|\varphi_j^{R(1)}\rangle$ et son inverse $[R^{(1)}]^{-1}$ a pour vecteurs lignes les vecteurs gauches $\langle \varphi_j^{L(1)}|$. L'équation de Schrödinger (5.59) se réécrit dans la base adiabatique associée à l'Hamiltonien $H^{(1)}$

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} |\phi^{(2)}\rangle = H^{(2)} |\phi^{(2)}\rangle \quad (5.61)$$

avec le nouveau Hamiltonien

$$\begin{aligned} H^{(2)} &= [R^{(1)}]^{-1} H^{(1)} R^{(1)} - i\epsilon [R^{(1)}]^{-1} \frac{\partial}{\partial \tau} R^{(1)} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_+^{(1)} & i\epsilon\gamma^{(1)} \\ -i\epsilon\gamma^{(1)} & \lambda_-^{(1)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.62)$$

et la nouvelle fonction d'onde

$$|\phi^{(2)}\rangle = [R^{(1)}]^{-1} [R^{(0)}]^{-1} |\phi^{(0)}\rangle \quad (5.63)$$

En procédant de cette manière, on obtient après $(n+1)$ étapes l'équation de Schrödinger

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} |\phi^{(n+1)}\rangle = H^{(n+1)} |\phi^{(n+1)}\rangle \quad (5.64)$$

avec

$$|\phi^{(n+1)}\rangle = [R^{(n)}]^{-1} \dots [R^{(0)}]^{-1} |\phi^{(0)}\rangle \quad (5.65)$$

et

$$\begin{aligned} H^{(n+1)} &= [R^{(n)}]^{-1} H^{(n)} R^{(n)} - i\epsilon [R^{(n)}]^{-1} \frac{\partial}{\partial \tau} R^{(n)} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_+^{(n)} & i\epsilon\gamma^{(n)} \\ -i\epsilon\gamma^{(n)} & \lambda_-^{(n)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.66)$$

Par induction, les éléments non-diagonaux de l'Hamiltonien $H^{(n+1)}$ sont maintenant de l'ordre $\epsilon^{(n+1)}$ [79–81]. Il est donc tentant de négliger² ces éléments permettant ainsi une meilleure approximation adiabatique. En particulier, si nous supposons que le système est initialement connecté à l'état $|j\rangle$, alors on a

$$\begin{aligned} |\phi_j^{(0)}\rangle &\approx R^{(0)} \dots R^{(n)} |j\rangle \times \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \lambda_j^{(n)}(\tau') \right] \\ &\equiv |\varphi_j^{(n)}\rangle_I. \end{aligned} \quad (5.67)$$

2. L'approximation (5.67), est vraie pour les systèmes non dissipatifs mais pas en général pour les systèmes dissipatifs comme nous l'avons montré dans la section précédente. En effet, l'approximation (5.67) est vérifiée uniquement lorsque le système suit la valeur propre la moins dissipative pour les modèles sans croisement des parties imaginaires des valeurs propres. Nous allons dans la suite utiliser l'approximation (5.67) comme une base pour le développement de la fonction d'onde du système. Nous verrons dans la suite comment ces bases nous permettent de calculer les transitions non adiabatiques à chaque instant.

Il faut noter que les valeurs propres du système $\lambda_{\pm}^{(n)}$ obtenues à chaque itération n sont approximativement égales. En particulier, elles coïncident dans les intervalles de temps où l'Hamiltonien $H^{(0)}$ reste constant.

L'approximation (5.67) montre alors que la fonction d'onde suit le j^{me} état auquel elle s'est connectée initialement. Cependant elle ne permet pas de décrire les transitions non-adiabatiques vers les autres états vu qu'on a négligé les corrections non-adiabatiques qui deviennent de moins en moins importantes au-delà de la limite adiabatique notamment de l'ordre $e^{-\frac{cte}{\epsilon}}$ [6, 41]. Dans la suite, nous allons utiliser l'approximation (5.67) comme une base pour le développement de la fonction d'onde.

Cependant, le calcul montre que la procédure diverge lorsque $n \rightarrow \infty$. En effet, les termes de couplage non-adiabatiques deviennent rapidement de plus en plus petits d'une itération à l'autre, mais la diminution du paramètre ϵ^n est éventuellement surcompensée par la croissance de la dérivée temporelle due au terme $[R^{(n)}]^{-1} \frac{\partial}{\partial \tau} R^{(n)}$. Ainsi, il existe une itération critique $n = n_c$ pour laquelle les termes de couplage non-adiabatiques sont les plus petits.

5.4.2 Les bases superadiabatiques de Berry

Il existe un autre concept étroitement lié qui vise dans le même sens, à savoir les bases superadiabatiques introduites par Berry dans son étude de l'histoire des transitions non-adiabatiques dans les systèmes quantiques à deux niveaux [40]. Appliquant l'idée de Berry à des systèmes dissipatifs, nous écrivons la fonction d'onde du système comme une série formelle en puissance de ϵ dont le terme le plus bas (i.e $m = 0$) correspond à l'approximation adiabatique standard

$$|\phi_{\pm}^{(0)}\rangle = \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \lambda_{\pm}^{(0)}(\tau') \right] \sum_{m=0}^{+\infty} \epsilon^m |u_{\pm}^{(m)}\rangle, \quad (5.68)$$

où le vecteur $|u_{\pm}^{(m)}\rangle$ est défini comme une combinaison linéaire des vecteurs propres instantanés

$$|u_{\pm}^{(m)}\rangle = \alpha^{(m)}(\tau) |\varphi_{\pm}^{(0)}\rangle + \beta^{(m)}(\tau) |\varphi_{\mp}^{(0)}\rangle. \quad (5.69)$$

Vu que les transitions non-adiabatiques sont de l'ordre de $e^{-\frac{cont}{\epsilon}}$, alors au-delà d'un ordre m élevé, la série (5.68) ne peut pas décrire ces transitions et doit donc diverger [40] de la même manière que les bases itératives introduites précédemment. Toutefois, en mettant fin à la série pour un ordre n fini, nous obtenons les bases superadiabatiques

$$|\phi_{\pm}^{(n)}\rangle_S = \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \lambda_{\pm}^{(0)}(\tau') \right] \sum_{m=0}^n \epsilon^m |u_{\pm}^{(m)}\rangle. \quad (5.70)$$

Comme le montre Berry pour les systèmes à deux niveaux, il existe un ordre optimal $n = n_c$ pour lequel les bases superadiabatiques associées donnent une meilleure description de la dynamique dans la limite adiabatique.

Dans la suite, les bases superadiabatiques basées sur la série (5.70) seront étiquetées par " S " et les bases obtenues par processus itératif seront étiquetées par " I ". Dans la section suivante, nous allons montrer à l'aide d'un exemple typique que les deux bases sont en certain sens complémentaires, et conduisent à des résultats physiques très similaires.

5.5 Histoire des transitions non-adiabatiques dans les bases superadiabatiques de Berry

Dans cette section, nous décrivons la dynamique du système dans la base superadiabatique de Berry $|\varphi_{\pm}^{(n)}\rangle_S$. Nous écrivons donc la fonction d'onde comme une combinaison linéaire

$$\begin{aligned} |\phi^{(0)}\rangle &= c_+^{(n)}(\tau)|\varphi_+^{(n)}\rangle_S + c_-^{(n)}(\tau)|\varphi_-^{(n)}\rangle_S \\ &\equiv R^{(n)}(\tau)|c^{(n)}(\tau)\rangle, \end{aligned} \quad (5.71)$$

où $|c^{(n)}\rangle$ est un vecteur colonne de composantes $c_+^{(n)}$ et $c_-^{(n)}$ et $R^{(n)}$ est la transformation qui a pour vecteurs colonnes les vecteurs droits $|\varphi_{\pm}^{(n)}\rangle_S$:

$$R^{(n)}(\tau) = \begin{pmatrix} \varphi_{+,1}^{(n)} & \varphi_{-,1}^{(n)} \\ \varphi_{+,2}^{(n)} & \varphi_{-,2}^{(n)} \end{pmatrix}. \quad (5.72)$$

Substituant la fonction d'onde (5.71) dans l'équation de Schrödinger (5.14), les coefficients $c_+^{(n)}$ et $c_-^{(n)}$ obéissent à l'équation

$$i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau} |c^{(n)}(\tau)\rangle = H^{(n)} |c^{(n)}(\tau)\rangle \quad (5.73)$$

avec le nouveau Hamiltonien

$$H^{(n)} = [R^{(n)}]^{-1} (H^{(0)} - i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau}) R^{(n)}. \quad (5.74)$$

Un calcul élémentaire donne alors la forme explicite

$$H^{(n)} = \begin{pmatrix} H_{++}^{(n)} & H_{+-}^{(n)} \\ H_{-+}^{(n)} & H_{--}^{(n)} \end{pmatrix}, \quad (5.75)$$

où

$$H_{lk}^{(n)} = {}_S \langle \varphi_l^{(n)} | (H^{(0)} - i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau}) | \varphi_k^{(n)} \rangle_S, \quad (l,k) = (+,-) \quad (5.76)$$

Les transitions non-adiabatiques entre les états $|\varphi_+^{(n)}\rangle_S$ et $|\varphi_-^{(n)}\rangle_S$ sont induites par les éléments non-diagonaux de l'Hamiltonian $H^{(n)}$. Nous pouvons donc utiliser la théorie des perturbations à l'ordre le plus bas afin d'estimer ces transitions. Dans la suite, nous considérons que le système est initialement connecté à l'état propre $|+\rangle$, i.e.

$$|c^{(n)}(-\infty)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.77)$$

Les transitions non-adiabatiques sont donc donnés par l'amplitude $c_-^{(n)}$. En tenant compte maintenant du fait que $c_+^{(n)}$ demeure de l'ordre unité au cours de la dynamique, on obtient

$$c_-^{(n)}(\tau) \approx -\frac{i}{\epsilon} \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' H_{--}^{(n)}(\tau') \right] \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' H_{-+}^{(n)}(\tau') \exp \left[\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau'} d\tau'' H_{--}^{(n)}(\tau'') \right]. \quad (5.78)$$

Les coefficients $\alpha^{(m)}$ et $\beta^{(m)}$ peuvent être déterminés en remarquant que $|\phi_+^{(n)}\rangle_S$ est solution de l'équation de Schrödinger

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_+^{(n)}\rangle_S = H^{(0)} |\varphi_+^{(n)}\rangle_S \quad (5.79)$$

avec les conditions

$$\alpha^{(0)}(\tau) = 1, \quad \beta^{(0)}(\tau) = 0, \quad \alpha^{(m)}(-\infty) = \beta^{(m)}(-\infty) = 0 \quad (m > 0). \quad (5.80)$$

En tenant compte de la relation

$$|\dot{\varphi}_{\pm}^{(0)}\rangle = \mp \frac{1}{2} \dot{\theta} |\varphi_{\mp}^{(0)}\rangle, \quad (5.81)$$

un calcul élémentaire donne

$$\beta^{(m)}(\tau) = -\frac{\dot{\alpha}^{(m)}(\tau)}{\dot{\theta}}, \quad (m > 0) \quad (5.82)$$

et la relation de récurrence

$$\dot{\alpha}^{(m)} = \frac{i}{\lambda} \left[\dot{\alpha}^{(m-1)} \frac{\ddot{\theta}}{\dot{\theta}} - \frac{1}{4} \dot{\theta}^2 \alpha^{(m-1)} - \ddot{\alpha}^{(m-1)} \right]. \quad (5.83)$$

Maintenant pour évaluer l'amplitude de transition $c_-^{(n)}$, on doit tout d'abord calculer les éléments de matrice $H_{-+}^{(n)}$ et $H_{--}^{(n)}$ associés à l'Hamiltonien (5.75). En particulier, nous avons besoin de connaître l'effet de l'opérateur $H^{(0)} - i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau}$ sur le vecteur $|\varphi_+^{(n)}\rangle_S$. En tenant compte des relations (5.81) et (5.82), on obtient

$$\begin{aligned} (H^{(0)} - i\epsilon \frac{\partial}{\partial \tau}) |\varphi_+^{(n)}\rangle_S &= -\lambda e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_+(\tau') d\tau'} \left(\sum_{m=0}^n \epsilon^m \frac{2\dot{\alpha}^{(m)}}{\dot{\theta}} - \sum_{m=0}^n \epsilon^{m+1} \frac{2\dot{\alpha}^{(m+1)}}{\dot{\theta}} \right) |\varphi_-^{(0)}\rangle \\ &= \lambda \epsilon^{n+1} \frac{2\dot{\alpha}^{(n+1)}}{\dot{\theta}} e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_+(\tau') d\tau'} |\varphi_-^{(0)}\rangle. \end{aligned} \quad (5.84)$$

Ainsi, on obtient à l'ordre le plus bas en ϵ

$$H_{-+}^{(n)} \approx \lambda \epsilon^{n+1} \frac{2\dot{\alpha}^{(n+1)}}{\dot{\theta}} e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau} \lambda(\tau') d\tau'}. \quad (5.85)$$

Un calcul similaire montre que l'élément de matrice H_{n--} est de l'ordre de $\epsilon^{(n+2)}$. Afin d'évaluer (5.78) à l'ordre le plus bas en ϵ , nous pouvons remplacer dans la limite adiabatique les exponentielles par l'unité (puisque les exposants sont maintenant de l'ordre $\epsilon^{(n+1)}$). L'amplitude de transition s'écrit alors dans la même base superadiabatique

$$c_-^{(n)}(\tau) \approx -2i\epsilon^n \int_{-\infty}^{\tau} d\tau' \lambda(\tau') \frac{\dot{\alpha}^{(n+1)}(\tau')}{\dot{\theta}(\tau')} e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{\tau'} \lambda(s) ds}. \quad (5.86)$$

À ce stade, il est naturel de définir la nouvelle variable ω (proportionnelle à l'action) qui jouera un rôle important dans ce qui suit

$$\omega(\tau) = \int_0^{\tau} d\tau' \lambda(\tau'). \quad (5.87)$$

En terme de ω , l'amplitude de transition se réécrit

$$c_-^{(n)}(\tau) \approx -2i\epsilon^n e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(s) ds} \int_{-\infty}^{\omega(\tau)} d\omega \frac{\alpha'^{(n+1)}}{\theta'} e^{-\frac{i}{\epsilon} \omega}, \quad (5.88)$$

où le prime indique la dérivée par rapport à ω .

Considérons tout d'abord l'ordre $n = 0$ qui correspond à la base adiabatique ordinaire et le problème de l'évaluation de l'amplitude finale :

$$c_-^{(0)}(+\infty) \approx -\frac{1}{2} \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(s) ds \right] \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \theta'(\omega) \exp \left(-i \frac{\omega}{\epsilon} \right). \quad (5.89)$$

La fonction $\theta'(\omega)$ est analytique au voisinage de l'axe réel. L'intégrale (5.89) peut-être calculée par le théorème des résidus. Il suffit donc de refermer le contour d'intégration par un demi-cercle dans le demi-plan complexe inférieur et qui contient la première singularité ω_c associée à la fonction $\theta'(\omega)$. Notons que la première singularité correspond au point dont la partie imaginaire $-\Im(\omega_c)$ est la plus petite ce qui donne la contribution dominante à $c_-^{(0)}(+\infty)$. L'origine de cette singularité provient du fait que les valeurs propres du système sont dégénérées dans le plan complexe. Plus précisément, la fonction λ admet un zéro complexe simple qui correspond à un pôle simple de résidu $+\frac{i}{3}$ pour la fonction θ' . Plus particulièrement, on peut écrire au voisinage de ω_c

$$\theta'(\omega) \approx \frac{i}{3}(\omega - \omega_c). \quad (5.90)$$

Le contour d'intégration donne alors

$$c_-^{(0)}(+\infty) \approx \frac{\pi}{3} \exp \left\{ -\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(s) ds \right\} \exp \left\{ -i \frac{\omega_c}{\epsilon} \right\}. \quad (5.91)$$

Cependant, il est bien connu que le préfacteur $\frac{\pi}{3}$ qui apparaît dans la formule (5.91) est faux. Cette erreur provient de la technique utilisée pour le calcul de l'amplitude de transition à savoir l'usage de la théorie de perturbation à l'ordre le plus bas, qui lorsque l'on applique à la base adiabatique d'ordre zéro, elle donne une amplitude finale qui diffère de la limite adiabatique exacte par un facteur de $\frac{\pi}{3}$. Nous verrons dans la suite comment l'usage de la théorie des perturbations à l'ordre le plus bas appliquée aux bases superadiabatiques d'ordres élevés, permet de renormaliser successivement le facteur $\frac{\pi}{3}$ à l'unité. La formule exacte est donc

$$c_-^{(0)}(+\infty) \approx \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(s) ds \right] \exp \left(-i \frac{\omega_c}{\epsilon} \right). \quad (5.92)$$

La probabilité de transition non-adiabatique s'écrit alors à la fin de l'interaction

$$\begin{aligned} P(+\infty) &= \left| c_-^{(0)}(+\infty) \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda_-(\tau) d\tau \right] \right|^2 \\ &= \exp \left(\frac{2}{\epsilon} \Im \left[\int_{-\infty}^0 \lambda_+(\tau) d\tau + \int_0^{+\infty} \lambda_+(\tau) d\tau \right] \right) \exp \left(\frac{2}{\epsilon} \Im(\omega_c) \right). \end{aligned} \quad (5.93)$$

Nous retrouvons donc la formule établie dans le chapitre précédent. Mais ceci n'est pas le problème que nous voulons résoudre. Afin de décrire l'histoire des transitions non-adiabatiques (plutôt que l'amplitude finale), nous devons être sur l'axe réel plutôt que dans le plan complexe. En plus, nous cherchons à calculer l'amplitude de transition dans les bases superadiabatiques d'ordre n élevé. Afin de remédier à ce problème, nous adoptons le raisonnement de Berry [40] en particulier nous devons résoudre l'équation (5.88) avec (5.83). En terme de la variable ω , nous obtenons

$$\alpha'^{(m)} = i \left(\frac{\alpha^{(m-1)}}{36(\omega - \omega_c)^2} - \frac{\alpha'^{(m-1)}}{(\omega - \omega_c)} - \alpha''^{(m-1)} \right), \quad (5.94)$$

dont la solution exact est donnée par

$$\alpha^{(m)} = \frac{i^{(m)}(m - \frac{7}{6})!(m - \frac{5}{6})!}{(\omega - \omega_c)^m m!(-\frac{5}{6})!(-\frac{7}{6})!}, \quad (5.95)$$

soit

$$2i \frac{\alpha'^{(n+1)}}{\theta'} = \frac{i^{n+1}(n - \frac{1}{6})!(n - \frac{5}{6})!(1 + \frac{1}{6n})}{(\omega - \omega_c)^{n+1}(n-1)!(-\frac{1}{6})!(-\frac{5}{6})!}. \quad (5.96)$$

En raison de la formule de Stirling, les termes en factorielles dans l'équation (5.96) se simplifient. Après avoir ajouté la contribution de la singularité ω_c^* localisée dans le demi-plan complexe supérieur et vérifiant

$$\theta'(\omega) \approx -\frac{i}{3}(\omega - \omega_c^*), \quad (5.97)$$

nous obtenons sur l'axe réel

$$2i \frac{\alpha'^{(n+1)}}{\theta'} \approx \frac{n!i^{n+1}}{2\pi} \left(\frac{1}{(\omega - \omega_c)^{n+1}} - \frac{1}{(\omega - \omega_c^*)^{n+1}} \right). \quad (5.98)$$

Toutefois, il est possible de prendre ω_c comme imaginaire pure, i.e.

$$\omega_c = -i|\omega_c|. \quad (5.99)$$

En développant maintenant l'équation (5.98) en terme de $\frac{\omega}{|\omega_c|}$, on obtient pour $n \gg 1$

$$\begin{aligned} 2i \frac{\alpha'^{(n+1)}}{\theta'} &\approx \frac{n^{n+\frac{1}{2}} \exp(-n)}{\sqrt{2\pi}|\omega_c|^{n+1}} \exp \left[-\frac{(n+1)\omega^2}{2|\omega_c|^2} \right] \\ &\times \left\{ \exp \left[i \frac{(n+1)\omega}{|\omega_c|} \right] + (-1)^n \exp \left[-i \frac{(n+1)\omega}{|\omega_c|} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.100)$$

Notons qu'en choisissant

$$n = n_c \equiv \text{Int} \left| \frac{\omega_c}{\epsilon} \right| \quad (5.101)$$

les oscillations dans l'équation (5.100) peuvent être complètement éliminées et l'intégrand prend alors la forme simple

$$2i\epsilon^n \frac{\alpha'^{(n+1)}}{\theta'} \exp \left(-i \frac{\omega}{\epsilon} \right) \approx \frac{1}{(2\pi|\omega_c|)^{\frac{1}{2}}} \exp \left(-\frac{\omega^2}{2\epsilon|\omega_c|} \right) \exp \left(-\frac{|\omega_c|}{\epsilon} \right). \quad (5.102)$$

Substituant l'équation (5.102) dans (5.88), l'amplitude de transition s'écrit simplement

$$\begin{aligned} c_-^{(n_c)}(\tau) &\approx -\frac{1}{2} \exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(\tau) d\tau \right] [1 + \text{erf}(\sigma)] \exp \left(-\frac{|\omega_c|}{\epsilon} \right), \\ &\approx -\exp \left[-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(\tau) d\tau \right] c_T^{(n_c)}, \end{aligned} \quad (5.103)$$

où erf est la fonction erreur et

$$\sigma(\tau) = \frac{\omega(\tau)}{\sqrt{2\epsilon|\omega_c|}}. \quad (5.104)$$

Le résultat (5.103) montre alors qu'il existe une base *optimale*, pour laquelle les transitions non-adiabatiques se produisent d'une façon *universelle*. Autrement dit, l'amplitude $c_-^{(n_c)}$ évolue vers sa valeur finale $e^{-\frac{|\omega_c|}{\epsilon}}$ d'une façon monotone décrite par la fonction erreur. Pour $n \ll n_c$, l'amplitude $c_T^{(n)}$ évolue avec fortes oscillations, de l'ordre de ϵ^{n+1} , réparties sur de larges intervalles de temps. Pour $n \gg n_c$, les oscillations sont encore importantes en raison de la divergence factorielle dans les équations (5.98) et (5.100). Notons que en raison du terme $e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(\tau) d\tau}$, les amplitudes de transitions $c_-^{(n)}$ divergent³ exponentiellement pour $n \ll n_c$. L'usage des bases superadiabatiques d'ordre élevé permet donc la suppression de cette divergence comme le montre la figure 5.8

5.6 Histoire des transitions non-adiabatiques dans les bases superadiabatiques itératives

Dans cette section, nous calculons l'histoire des transitions non-adiabatiques dans les bases superadiabatiques itératives. Notre raisonnement se base sur le fait que les deux procédures (i.e les bases $|\varphi_{\pm}^{(n)}\rangle_I$ et $|\varphi_{\pm}^{(n)}\rangle_S$) conduisent à des résultats physiques très similaires, en particulier l'universalité des transitions non-adiabatiques obtenues à un ordre optimal n_c . Nous établissons donc une relation entre les amplitudes $c_{T,I}^{(n)}$ calculées dans les bases itératives et les amplitudes $c_{T,S}^{(n)}$ établies précédemment dans les bases superadiabatiques de Berry. Notre point de départ est le résultat général (5.9) établi dans les bases adiabatiques d'ordre 0 dans ce chapitre. Dans les bases superadiabatiques itératives l'équation (5.9) garde la même forme, mais les valeurs et vecteurs propres remplacés par ceux calculés à l'ordre n :

$$|\psi(\tau)\rangle = c_1^{(n)} e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_1^{(n)}(\tau') d\tau'} |\varphi_1^{(n)}(\tau)\rangle_I + c_{T,I}^{(n)}(\tau) e^{-iT [\int_{-\infty}^0 \lambda_1^{(n)}(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_2^{(n)}(\tau') d\tau']} |\varphi_2^{(n)}(\tau)\rangle_I. \quad (5.105)$$

La probabilité de transition non-adiabatique s'écrit donc dans la base superadiabatique itérative :

$$P(\tau) = |\langle \varphi_2^{L(n)} | \psi(\tau) \rangle|^2 = |c_{T,I}^{(n)}|^2 e^{\frac{2\Im}{\epsilon} [\int_{-\infty}^0 \lambda_1^{(n)}(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_2^{(n)}(\tau') d\tau']}. \quad (5.106)$$

D'autre part, dans la base superadiabatique de Berry, la fonction d'onde s'écrit

$$|\psi(\tau)\rangle = c_1^{(n)} e^{-iT \int_{-\infty}^{\tau} \lambda_1^{(0)}(\tau') d\tau'} |\varphi_1^{(n)}(\tau)\rangle_S + c_{T,S}^{(n)}(\tau) e^{-iT [\int_{-\infty}^0 \lambda_1^{(0)}(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_2^{(0)}(\tau') d\tau']} |\varphi_2^{(n)}(\tau)\rangle_S, \quad (5.107)$$

et la probabilité de transition non-adiabatique à l'ordre n s'écrit donc

$$P(\tau) = |{}_S \langle \varphi_2^{L(n)} | \psi(\tau) \rangle|^2 = |c_{T,S}^{(n)}|^2 e^{\frac{2\Im}{\epsilon} [\int_{-\infty}^0 \lambda_1^{(0)}(\tau') d\tau' + \int_0^{\tau} \lambda_2^{(0)}(\tau') d\tau']}. \quad (5.108)$$

Nous avons montré dans la section précédente qu'il existe un ordre optimal pour lequel les transitions non-adiabatiques se produisent d'une manière universelle. Pour $n = n_c$ on peut

3. Pour un modèle avec croisement d'énergies, si on considère un suivi adiabatique le long de la valeur propre la moins dissipative, alors on $\Im(\lambda_+) > \Im(\lambda_-)$ pour $\tau < 0$ et le terme $|e^{-\frac{i}{\epsilon} \int_{-\infty}^0 \lambda(\tau) d\tau}|$ diverge dans la limite adiabatique comme $e^{\frac{C_{\text{cont}}}{\epsilon}}$.

donc considérer que les probabilités de transitions (5.106) et (5.108) coïncident. On obtient donc

$$|c_{T,I}^{(n_c)}|^2 = e^{\frac{2Im}{\epsilon} [\int_{-\infty}^0 \lambda_1^{(0)}(\tau') d\tau' - \int_{-\infty}^0 \lambda_1^{(n_c)}(\tau') d\tau']} e^{\frac{2Im}{\epsilon} [\int_0^\tau \lambda_2^{(0)}(\tau') d\tau' - \int_0^\tau \lambda_2^{(n_c)}(\tau') d\tau']} |c_{T,S}^{(n_c)}|^2, \quad (5.109)$$

où l'amplitude $c_{T,S}^{(n_c)}$ est définie par l'équation (5.103). Le résultat (5.109) montre alors que les coefficients $c_{T,I}^{(n_c)}(+\infty)$ varient légèrement d'une itération à l'autre. Un tel comportement qui ne se produit pas dans le cas d'un système non dissipatif, est générique pour le cas dissipatif

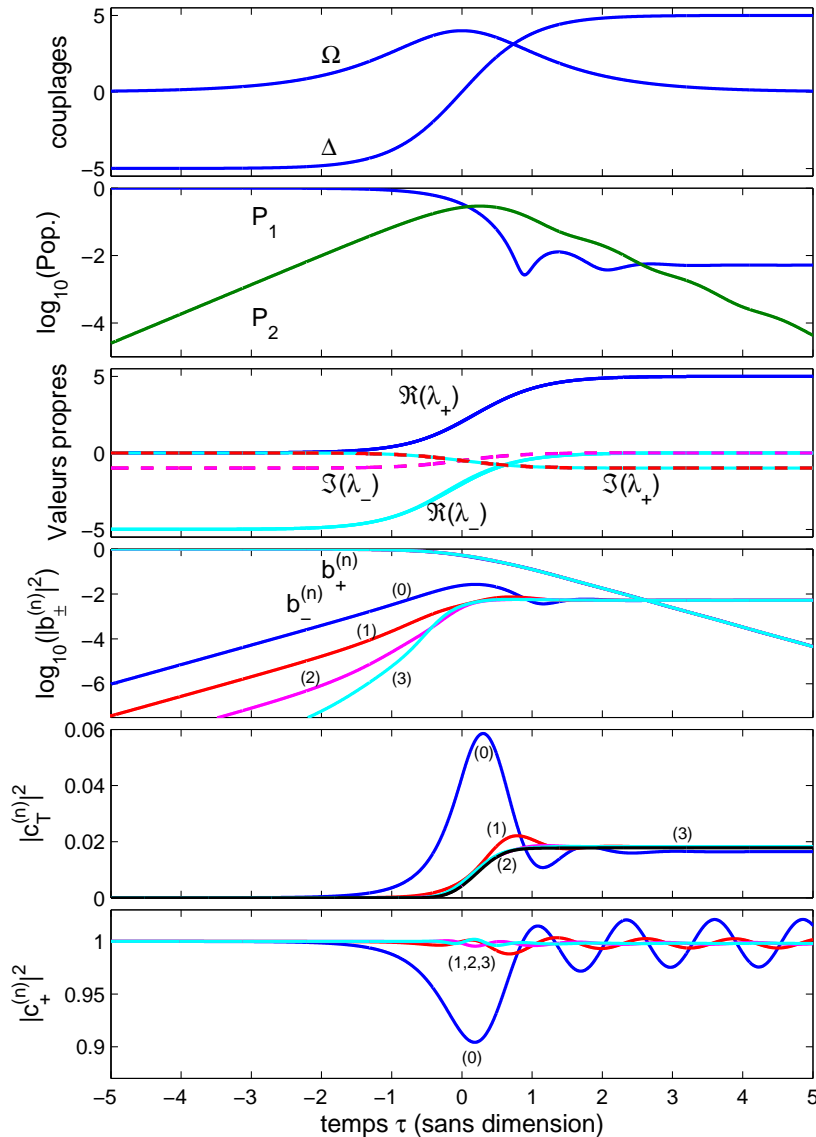


FIG. 5.8 – La dynamique adiabatique du modèle Allen-Eberly dissipatif définie par $\Omega(\tau) = \Omega_0 \text{sech}(\tau)$ et $\Delta(\tau) = \Delta_0 \tanh(\tau)$, avec $\Omega_0 T = 4$, $\Delta_0 T = 5$ et $\Gamma T = 1$, calculée dans les bases superadiabatiques itératives (5.67) (jusqu'à l'ordre $n=3$). Dans cet exemple nous avons considéré le cas où le système est initialement connecté au vecteur propre le moins dissipatif $|\varphi_+\rangle$. Notons que cette dynamique correspond essentiellement à la trajectoire (b) qui entoure la singularité tracée dans la Fig 5.1.

quand on utilise les bases superadiabatiques itératives. Ceci provient du fait que les valeurs propres du système changent légèrement d'une itération à l'autre. Nous avons tracé dans la figure 5.6 la dynamique du modèle Allen-Eberly dissipatif dans les bases superadiabatiques itératives (jusqu'à l'ordre 3). Le point principal ici est que l'usage de bases superadiabatiques d'ordre supérieur permet l'élimination de la divergence exponentielle du coefficient $c_T^{(n_c)}$ qui est présente dans les bases d'ordre zéro. En particulier, pour $n = n_c$, l'amplitude $|c_T^{(n_c)}|^2$ évolue vers sa valeur finale $e^{-2\frac{|\omega c|}{\epsilon}}$ d'une façon monotone. D'autre part, l'utilisation de bases superadiabatiques permet une réduction considérable des oscillations de l'amplitude $|c_+^{(n)}|^2$, qui deviennent imperceptibles pour $n = n_c$. Nous remarquons de plus que l'usage des bases superadiabatiques permet une plus grande séparation entre les coefficients $|b_+^{(n)}|$ et $|b_-^{(n)}|$ avant leur croisement, permettant ainsi une meilleure approximation adiabatique.

5.7 Conclusion

Notre analyse a permis de formuler la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux dans la limite adiabatique, qui est valable au-delà du régime des faibles dissipations. Nous avons montré en particulier qu'un théorème adiabatique standard ne peut pas être appliqué pour les modèles avec croisement des parties imaginaires des valeurs propres. Le concept topologique du passage adiabatique nous a permis de sélectionner toutes les trajectoires possibles qui mènent à un transfert de population à la fin de l'interaction. La dynamique associée à ces trajectoires nécessite un couplage plus grand par rapport à la dissipation ($\Omega > \Gamma$).

L'usage des bases superadiabatiques nous a permis de calculer l'histoire des transitions non-adiabatiques généralisant ainsi l'analyse de la Réf. [40] à des systèmes dissipatifs. En particulier nous avons montré qu'il existe une base optimale permettant une meilleure approximation adiabatique.

Chapitre 6

Conclusion, discussion et perspectives

6.1 Conclusion

Dans cette thèse, nous avons décrit la technique adiabatique dans les systèmes quantiques pour laquelle la fonction d'onde du système suit continûment l'état propre auquel elle s'est connectée initialement. Contrairement aux méthodes de type impulsion- π , le passage adiabatique est une technique très robuste dans le sens où le transfert de population final sera relativement insensible aux fluctuations des paramètres du champ laser. Cependant, le passage adiabatique consiste à faire évoluer le système de façon relativement lente et requiert donc une aire d'impulsion à priori large.

Toutefois, nous avons montré qu'il est possible d'optimiser le passage adiabatique si la dynamique suit des trajectoires particulières dans l'espace des paramètres. En effet, nous avons vu que la ligne de niveau, définie de sorte que la différence des valeurs propres soit constante à chaque instant, permet de minimiser à zéro les transitions non-adiabatiques données par la formule D.D.P. Des études récentes sur le passage adiabatique parallèle ont été réalisées dans la référence [8] et ont confirmé l'efficacité de cette technique en terme de robustesse et transfert de population final.

Nous avons généralisé cette stratégie à des systèmes à trois niveaux en Λ . Les paramètres de couplage sont conçus de telle sorte que les valeurs propres du système restent parallèles à chaque instant. Nous avons montré en particulier, comment cette technique nous a permis de combiner à la fois l'efficacité énergétique des méthodes impulsion- π et la robustesse du passage adiabatique. Cette stratégie est bien supérieure au processus STIRAP conventionnel en terme d'efficacité de transfert de population par rapport à l'aire totale d'impulsion. Nous avons montré également que cette technique est pratiquement réalisable en utilisant les outils modernes de mise en forme d'impulsions.

Dans la deuxième partie de la thèse, nous avons analysé l'influence de l'environnement extérieur sur la dynamique adiabatique du système. Nous avons montré d'abord que sous certaines conditions, il est possible de décrire un système dissipatif par une équation de Schrödinger avec un Hamiltonien effectif ne tenant compte que des effets dominants de la dynamique. En effet, les effets de la dissipation sur le système peuvent s'exprimer par un Hamiltonien non hermitien dont le taux de perte de population d'un état excité est traité comme une partie imaginaire de l'énergie associée à cette état. Nous avons montré également que le taux de la dissipation peut être dépendant du temps. Une telle situation est envisagée dans un processus de transfert de population d'un état fondamental d'un atome à un état excité couplé au continuum. Ces Hamiltoniens effectifs sont ensuite utilisés pour décrire la

dynamique adiabatique d'un système dissipatif à deux niveaux. L'usage de la méthode des temps complexes nous a permis en particulier de généraliser la formule DDP à des systèmes dissipatifs à deux niveaux. Toutefois, la validité des principales formules établies [Eqs (4.80) et (4.81)] est garantie par l'existence d'un chemin dissipatif qui se connecte à l'axe réel à $\tau \rightarrow \pm\infty$. Nous avons montré que lorsque la dissipation vérifie $\Gamma(\pm\infty) = 0$, nous retrouvons la situation qui est similaire aux cas des systèmes non dissipatifs puisque les lignes de Stokes sont bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$. Dans l'autre cas où la dissipation est constante, la situation est différente puisque les lignes de Stokes ne sont pas bornées à $\tau \rightarrow \pm\infty$ et nous sommes forcés de déformer le contour d'intégration afin de se connecter à l'axe réel.

Cette analyse nous a permis de formuler la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux dans la limite adiabatique. Le principal résultat (5.9) peut être considéré comme étant l'approximation adiabatique généralisée pour les systèmes dissipatifs à deux niveaux qui est valable au-delà du régime de faible dissipation. Nous avons montré en particulier qu'un théorème adiabatique standard ne peut être appliqué pour les modèles avec croisement des parties imaginaires des valeurs propres. Ceci est du principalement à la concurrence entre les phases dissipatives associées aux états propres du système.

Le concept topologique du passage adiabatique nous a permis de sélectionner toutes les trajectoires possibles qui mènent à un transfert de population à la fin de l'interaction. La dynamique associée à ces trajectoires correspond en général à un couplage plus grand que la dissipation. L'usage des bases superadiabatiques de Berry nous a permis en particulier de calculer l'histoire des transitions non-adiabatiques et montrent qu'il existe une base optimale permettant une meilleure approximation adiabatique.

6.2 Discussion

L'étude théorique du passage adiabatique parallèle a montré son efficacité en terme du transfert de population et robustesse. Cependant, la mise en oeuvre de la stratégie du passage adiabatique parallèle dans des systèmes réels est limitée par plusieurs obstacles tel que la présence d'autres états et les pertes dues à l'ionisation. Afin d'éviter ces limitations, nous devons considérer des systèmes dont l'état excité n'est pas couplé au continuum via une résonance à un photon et d'utiliser des intensités modérées, généralement pas plus de 100 GW/cm^2 pour les atomes.

La stratégie du passage adiabatique parallèle doit être adaptée pour produire d'une manière optimale une superposition d'états tel que le processus STIRAP fractionnaire. Cela devrait trouver des applications dans le domaine de l'information quantique comme par exemple l'implémentation de portes quantiques rapides, construire des algorithmes quantiques où encore construire des mémoires quantiques.

D'une manière générale, le passage adiabatique consiste à faire évoluer le système de façon relativement lente, et plus le processus sera long, plus les effets décohérents dus aux interactions avec l'environnement extérieur seront importants. Réduire le temps d'évolution diminue certes les pertes dues à la dissipation, mais augmente les pertes non-adiabatiques. Ainsi dans la référence [89], il est montré que le transfert de population s'effectue dans une zone intermédiaire.

Nous avons montré pour les systèmes non dissipatifs qu'il est possible de réduire le temps d'évolution tout en minimisant les pertes non-adiabatiques. La stratégie consiste alors à suivre

des lignes de niveaux *i.e.* des trajectoires dans l'espace des paramètres telles que la différence entre les valeurs propres est constante à chaque instant. Toutefois, cette technique ne peut être appliquée à des systèmes dissipatifs à deux niveaux. En effet, l'analyse de la topologie des surfaces d'énergies montre que les trajectoires qui mènent à un transfert de population sont accompagnées par un croisement des parties imaginaires des valeurs propres. D'autres techniques plus efficaces permettant de minimiser les pertes dues à la dissipation consiste à chercher des états sombres, *i.e.* des états qui sont associés à des valeurs propres dont la partie imaginaire est nulle. Le suivi adiabatique de ces états permet donc de s'affranchir des pertes dues à la dissipation et conduisent en général à un transfert complet de population.

6.3 Perspectives

Il est important de savoir si les techniques présentées dans cette thèse à savoir la topologie des surfaces d'énergies, les bases superadiabatiques et la formule DDP généralisée sont applicables à des systèmes dissipatifs avec plus de deux niveaux. Toutefois, l'équation de Lindblad associée à un système à deux niveaux soumis à la décohérence par déphasage peut être transformée en une équation de Schrödinger avec un Lindbladien effectif décrivant la dynamique d'un système à trois niveaux dans la sphère de Bloch. Cette approche conduit en général à des valeurs propres complexes. Il est donc important d'analyser la topologie des surfaces d'énergie dans l'espace des paramètres. Le problème principale pour ces systèmes dissipatifs à plus de deux niveaux est la présence d'une zone dans l'espace des paramètres pour laquelle l'Hamiltonien n'est pas diagonalisable [76]. Toutefois, l'usage de la technique superadiabatique a été appliquée dans ce cas afin de minimiser les transitions entre les blocs de Jordan dans la limite adiabatique [77]. Il serait intéressant de trouver un système physique qui présente une telle propriété et de décrire son influence sur la dynamique.

La généralisation de la formule DDP à un système non dissipatif à N niveaux a été proposée dans l'article original de Hwang et Pechukas [5]. Ce pendant sa validité nécessite une symétrie spécifique dans l'Hamiltonien [84–88]. Il est important donc de développer une technique qui permet de généraliser la formule DDP à des systèmes à N niveaux ($N > 2$). En particulier la méthode des temps complexe peut être une technique prometteuse.

Bibliographie

- [1] B.W. Shore, *The Theory of Coherent Atomic Excitation* (Wiley, New York, 1990); "Coherent manipulations of atoms using laser light", *Acta Physica Slovaca* **58**, 243 (2008).
- [2] M. Shapiro and P. Brumer, *Principles of the Quantum Control of Molecular Processes* (Wiley, New York, 2003).
- [3] M.A. Nielsen and I.L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
- [4] M. Born et V. Fock, *Beweis des Adiabatenatzes*, *Z. Phys.* **51**, 165 (1928).
- [5] J.-T. Hwang and P. Pechukas, *The adiabatic theorem in the complex plane and the semiclassical calculation of nonadiabatic transition amplitudes*. *J. Chem. Phys.* **67**, 4640 (1997).
- [6] A. M. Dykhne, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **41**, 1324 (1962) [*Sov. Phys. JETP* **14**, 941 (1962)].
- [7] S. Guérin, S. Thomas, and H.R. Jauslin, *Optimization of population transfer by adiabatic passage* *Phys. Rev. A* **65**, 023409 (2002).
- [8] S. Guérin, V. Hakobhyan and H. R. Jauslin, *Optimal adiabatic passage by shaped pulses: Efficiency and robustness*, *Phys. Rev. A* **84**, 013423 (2011).
- [9] G. Nenciu and G. Rasche, *One The Adiabatic Theorem for nonself-adjoint Hamiltonians*. *J. Phys. A* **25**, 5741 (1992).
- [10] A. Messiah, *Quantum Mechanics* (North-Holland, Amsterdam, 1962).
- [11] M.V. Berry, *Quantal phase factors accompanying adiabatic changes*, *Proc. R. Soc. Lond. A* **392**, 45 (1984).
- [12] T. Kato, *On the adiabatic theorem of quantum mechanics*, *Phys. Soc. Jap.* **5**, 435 (1958).
- [13] J. E. Avron, R. Seiler et L. G. Yaffe, *Adiabatic theorem and applications to the quantum Hall effect*, *Commun. Math. Phys.* **110**, 33 (1987).
- [14] G. Hagedorn, *Adiabatic expansions near eigenvalue crossings*, *Ann. Phys.* **196**, 278 (1989).
- [15] J. E. Avron, J. Howland et B. Simon, *Adiabatic theorems for dense point spectra*, *Commun. Math. Phys.* **128**, 497 (1990).
- [16] A. Joye, *An adiabatic theorem for singularity perturbed Hamiltonian*, *Ann. Inst. H. Poincaré, Sect. A* **63**, 231 (1995).
- [17] J. E. Avron et A. Elgart, *Adiabatic theorem without a gap condition: two-level system coupled to quantized radiation field*, *Phys. Rev. A* **58**, 4300 (1998).
- [18] J. E. Avron et A. Elgart, *Adiabatic theorem without a gap condition*, *Commun. Math. Phys.* **203**, 445 (1999).
- [19] A. Ceulemans et M. Szopa, *The Berry phase for a threefold degenerate state*, *J. Phys. A* **24**, 4495 (1991).

- [20] U. Gaubatz, P. Rudecki, M. Becker, S. Schiemann, M. Kulz et K. Bergmann, *Population switching between vibrational levels in molecular beams*, Chem. Phys. Lett. **149**, 463 (1988).
- [21] J. R. Kuklinski, U. Gaubatz, F. T. Hioe et K. Bergmann, *Adiabatic population transfer in a three-level system driven by delayed laser pulses*, Phys. Rev. A **40**, 6741 (1989).
- [22] P. Kral, I. Thanopoulos and M. Shapiro, *Coherently controlled adiabatic passage*. Rev. Mod. Phys. **79**, 53 (2007).
- [23] U. Gaubatz, P. Rudecki, S. Shiemann et K. Bergmann, *Population transfer between molecular vibrational levels by stimulated Raman scattering with partially overlapping laser fields. A new concept and experimental results*. J. Chem. Phys. **92**, 5363 (1990).
- [24] N. V. Vitanov et S. Stenholm, *Non-adiabatic effects in population transfer in three level systems*. Opt. Commun. **127**, 215 (1996).
- [25] K. Bergmann, H. Theuer et B. W. Shore, *Coherent population transfer among quantum states of atoms and molecules*, Rev. Mod. Phys. **70**, 1003 (1998).
- [26] G.S. Vasilev, A. Kuhn, and N.V. Vitanov, *Optimum pulse shapes for Stimulated Raman Adiabatic Passage*. Phys. Rev. A **80**, 013417 (2009).
- [27] G. Dridi, S. Guerin, V. Hakobyan H. R. Jauslin, and H. Eleuch, *Ultrafast stimulated Raman parallel adiabatic passage by shaped pulses*. Phys. Rev. A **80**, 043408 (2009).
- [28] U. Boscain, G. Charlot, J.-P. Gauthier, S. Guerin and H. R. Jauslin, J. Math. Phys. **43**, 2107 (2002).
- [29] Cohen-Tannoudji, C. B. Diu and F. Laloe. 1977, *Quantum Mechanics*, Vols. I and II (Wiley, New York).
- [30] P. L. Knight, M. A. Lauder and D. J. Dalton, *Laser-Induced Continuum Structure*, Physics Reports (Review Section of Physics Letters) **190**, 1-61 (1990).
- [31] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions: Basic Processes and Applications*, John Wiley and Sons, Inc. Wiley Interscience, New-York, (1998).
- [32] Haken. H, *Light*, Vol I. North-Holland, Amsterdam (1981).
- [33] Y. B. Band and O. Magnes, *Chirped adiabatic passage with temporally delayed pulses*. Phys. Rev. A **50**, 584 (1994).
- [34] I. R. Sola, V. S. Malinovsky, B. Y. Chang, J. Santamaria and K. Bergmann, Phys. Rev. A **59**, 4494 (1999).
- [35] M. P. Fewell, B. W. Shore and K. Bergmann, *Coherent Population Transfer among Three States: Full Algebraic Solution and The Relevance of Non Adiabatic Process to Transfer by Delayed Pulses.*, Aust. J. Phys **50**, 281-308, (1997).
- [36] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Commun. Math. Phys. **48**, 119, (1976).
- [37] K. Kraus, *Genral state changes in quantum theory*, Ann. Phys. **64**, 311 (1971). Phys, **48**, 119, (1976).
- [38] A. Joye, G. Mileti and Ch.-Ed. Pfister, *Interferences in adiabatic transition probabilities mediated by Stokes lines*. Phys. Rev. A **44**, 4280 (1991).
- [39] A. Joye, H. Kuntz and Ch.-Ed. Pfister, *Exponential decay and geometric aspect of the transition probabilities in the adiabatic limit*. Ann. Phys. (NY) **208**, 209 (1991).
- [40] M. V. Berry, *Historie of Adiabatic Quantum Transitions*. Proc. R. Soc. London A **429**, 61 (1990).

- [41] J. P. Davis and P. Pechukas, *Nonadiabatic transition induced by time-dependent Hamiltonian in the semiclassical adiabatic limit: The two-State case*. J. Chem. Phys. **64**, 3129 (1976).
- [42] G. Dridi, S. Guérin, H.R. Jauslin, D. Viennot and G. Jolicard, *Adiabatic approximation for quantum dissipative systems: Formulation, topology and superadiabatic tracking*. Phys. Rev. A **64**, 022109 (2010).
- [43] S. Guérin, L. P. Yatsenko and H. R. Jauslin, *Dynamical resonances and the topology of the multiphoton adiabatic passage*. Phys. Rev. A **63**, 031403(R) (2001).
- [44] A. Kvitsinsky and S. Puttermann, *Adiabatic evolution of an irreversible two level system*. J. Math. Phys. **32**, 1403 (1991).
- [45] R. Schilling, M. Vogelsberg and D. A. Garanin, *Nonadiabatic Transitions for decaying Two-Level-System: Geometrical and Dynamical Contributions*. J. Phys. A **39**, 13727 (2006).
- [46] M. V. Berry, *Geometric Amplitude Factors in Adiabatic Quantum Transitions*. Proc. R. Soc. London A **430**, 405 (1990).
- [47] L. Allen and J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-Level Atoms*. Dover, New York (1987).
- [48] M. Holthaus and B. Just, *Generalized π pulses* Phys. Rev. A **49**, 1950 (1994).
- [49] N. V. Vitanov, K.-A. Suominen and B. W. Shore, J. Phys. B **32**, 4535 (1999).
- [50] D. Daems, S. Guérin and N. J. Cerf, *Quantum search by parallel eigenvalue adiabatic passage* Phys. Rev. A **78**, 042322 (2008).
- [51] N. Rosen et C. Zener, *Double Stern-Gerlach experiment and related collision phenomena*. Phys. Rev. **40**, 502 (1932).
- [52] N.V. Vitanov, T. Halfmann, B.W. Shore and K. Bergmann, *Laser-Induced population transfer by adiabatic passage techniques*. Annu. Rev. Phys. Chem. **52**, 763 (2001).
- [53] A. M. Weiner, *Femtosecond pulse shaping using spatial light modulators*. Rev. Sci. Instrum. **71**, 1929. (2000).
- [54] A. Monmayrant and B. Chatel, *New phase and amplitude high resolution pulse shape*. Rev. Sci. Instrum. **75**, 2668 (2004).
- [55] T. Brixner and G. Gerber, *Adaptive Quantum Control of Femtochemistry*. Phys. Scr, T **110** (2004).
- [56] N. Dudovich, T. Polack, A. Pe'er, and Y. Silberberg, *Simple route to Strong-field coherent control*. Phys. Rev. Lett. **94**, 083002 (2005).
- [57] M. Aeschlimann, M. Bauer, D. Bayer, T. Brixner, F. J. García de Abajo, W. Pfeiffer, M. Rohmer, C. Spindler and F. Steeb, Nature (London) **446**, 301 (2007).
- [58] T. Bayer, M. Wollenhaupt and T. Baumert, *Strong-field landscaper of coherent electronic excitation*. J. Phys. B, **41**, 074007 (2008).
- [59] S. Guérin, A. Rouzée and E. Hertz, *Ultimate field-free molecular alignment by combined adiabatic-impulsive design*. Phys. Rev. A **77**, 041404 (R) (2008).
- [60] S. Guérin and H.R. Jauslin, Adv. Chem. Phys **125**, 147 (2003).
- [61] E.A. Shapiro, A. Pe'er, J. Ye, and M. Shapiro, *Piecewise adiabatic population transfer in Molecule via a wave packet*, Phys. Rev. Lett. **101**, 023601 (2008).
- [62] W. D. Heiss and H. L. Harney, *The chirality of exceptional points*, Eur. Phys. J. D **17**, 149-151 (2001).

- [63] Uwe Günther, Ingrid Rotter and Boris F Samsonov, *Projective Hilbert space structures at exceptional points*, J. Phys. A: Math. Theo. **40** 8815-8833 (2007).
- [64] Alexei A. Mailybaev, Oleg N. Kirillov, and Alexander P. Seyranian, *Geometric phase around exceptional points*, Phys. Rev. A **72**, 014104 (2005).
- [65] Holger Cartarius, Jörg Main, and Günter Wunner, *Exceptional points in atomic spectra*, PRL **99**, 173003 (2007).
- [66] A Mondragón and E. Hernández, *Degeneracy and crossing of resonance energy surfaces*, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 5595-5611 (1993).
- [67] A Mondragón and E. Hernández, *Berry phase of a resonant state*, Phys. A: Math. Gen. **29**, 2567-2585 (1996).
- [68] W. D. Heiss, *Repulsion of resonance states and exceptional points*, Physical Review E, **61**, 929 (2000).
- [69] M. V. Berry, F. R. S, and M. Wilkinson, *Diabolical points in the spectra of triangles*, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 15-43 (1984)
- [70] L. P. Yatsenko and V. I. Romanenko *Stimulated Raman adiabatic passage with partially coherent laser fields*, Phys. Rev. A **65**, 043409 (2002).
- [71] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2002).
- [72] C.W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum Noise* (Springer, Berlin, 2004).
- [73] U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, Singapore, 2008).
- [74] J.C. Garrison and E.M. Wright, Phys. Lett. A **128**, 177 (1988).
- [75] M.S. Sarandy and D.A. Lidar, *Adiabatic approximation in open quantum systems*, Phys. Rev. A **71**, 012331 (2005).
- [76] M. S. Sarandy and D. A. Lidar, *Adiabatic Quantum Computation in Open Systems*. Phys. Rev. Lett. **95**, 250503 (2005).
- [77] A. Joye, Commun. Math. Phys. **275**, 139 (2007).
- [78] M. Scala, B. Militello, A. Messina, and N. V. Vitanov, *Stimulated Raman adiabatic passage in an open quantum system: Master equation approach*, Phys. Rev. A **81**, 053847 (2010).
- [79] G. Nenciu, *Linear adiabatic theory. Exponential estimates*, Commun. Math. Phys. **152**, 479 (1993).
- [80] A. Joye and C.-E. Pfister, *Superadiabatic evolution and transition probability between two non-degenerate levels isolated in the spectrum*, J. Math. Phys. **34**, 454 (1993).
- [81] K. Drese and M. Holthaus, Eur. Phys. J. D **3**, 73 (1998).
- [82] V. M. Akulin and W. P. Schleich, *Landau-Zener transition to a decaying level*, Phys. Rev. A **46**, 4110 (1992).
- [83] N.V. Vitanov and S. Stenholm, *Pulsed excitation of a transition to a decaying level*, Phys. Rev. A **55**, 2982 (1997).
- [84] C.E. Carroll and F.T. Hioe, *Generalisation of the Landau-Zener calculation to three levels* J. Phys. A **19**, 1151 (1986).
- [85] S. Brundobler and V. Elser, *S-matrix for generalized Landau-Zener problem*, J. Phys. A **26**, 1211 (1993).
- [86] A. Joye and C.-E. Pfister, *Complex WKB method for 3-level scattering systems*, Asymptotic Analysis **23**, 91 (2000).

-
- [87] C. Fermanian Kammerer and V. Rousse, arXiv:0904.0211v2 [math.AP].
- [88] S.S. Ivanov and N.V. Vitanov, *Steering quantum transitions between three crossing energy levels*, Phys. Rev. A **77**, 023406 (2008).
- [89] X. Lacour, S. Guérin, and H.R. Jauslin, *Optimized adiabatic passage with dephasing*, Phys. Rev. A **78**, 033417 (2008).
- [90] A. Joye and Ch.-Ed. Pfister, *Full asymptotic expansion of transition probabilities in the adiabatic limit*, J. Phys. A **24**, 753 (1991).
- [91] L. P. Yatsenko, S. Guérin and H. R. Jauslin, *Topology of adiabatic passage*, Phys. Rev. A **65**, 043407 (2002).
- [92] D. Viennot, G. Jolicard and J.P. Killingbeck, *The topology of the adiabatic passage process for molecular photodissociative dynamics*, J. Phys. A **41**, 145303 (2008).
- [93] A.I. Nesterov and S.G. Ovchinnikov, *Geometric phases and quantum phase transitions in open systems*, Phys. Rev. E **78**, 015202(R) (2008).
- [94] Zener. C. *Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels*. Proc. Roy. Soc. London **137**, 696-702 (1932).
- [95] Majorana. E. *Atomi Orientati in Campo Magnetico Variabile*. Nuovo Cimento**9**, 43-50,(1932).
- [96] Landau. L. D. *Collected Papers of Landau*. Pergamon Press, Oxford Landon Edinburg New York Paris Frankfurt. (1965).
- [97] Dykne A. M. *Adiabatic Perturbation of Discrete Spectrum Sates*, Sov. Phys. JETP. **14**, 941-943, (1962).
- [98] Alain Joye, *Geometrical and mathematical aspects of the adiabatic theorem of quantum mechanics*, Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique Federale de Lausanne, (1992).

Contrôle quantique adiabatique : Technique de passage adiabatique parallèle et systèmes dissipatifs

Résumé : La première partie de cette thèse est consacrée à l'élaboration théorique de processus adiabatiques permettant le transfert de population entre un état initial et un état cible d'un système quantique. La stratégie du passage adiabatique parallèle pour laquelle les paramètres de couplage sont conçus de telle sorte que la différence des valeurs propres du système reste constante à chaque instant, permet de minimiser à zéro les transitions non-adiabatiques données par la formule DDP. Cette technique permet de combiner à la fois l'efficacité énergétique des méthodes impulsion- π et la robustesse du passage adiabatique.

La seconde partie de cette thèse concerne les effets de la dissipation sur le passage adiabatique. La formule de probabilité de transition d'un système à deux niveaux tenant compte des effets de la dissipation est établie. Cette formule permet de reformuler la solution générale d'un système dissipatif à deux niveaux dans la limite adiabatique qui est valable au-delà du régime de faible dissipation.

Mots clefs : Contrôle quantique, passage adiabatique, passage adiabatique parallèle, formule DDP, lignes de Stokes, systèmes quantiques dissipatifs.

Adiabatic quantum control: Parallel adiabatic passage technique and dissipative systems

Abstract : The first part of this thesis is devoted to the theoretical analysis of adiabatic processes allowing the transfer of population from an initial state to a target state of a quantum system. The strategy of parallel adiabatic passage, in which the coupling parameters are specifically designed to optimize the adiabatic passage corresponding to parallel eigenvalues at all times, allows one to combine the energetically efficiency of π - pulse and related strategies with the robustness of standard adiabatic passage.

The second part of this thesis concerns the effects of the dissipation in adiabatic passage. The non-adiabatic transition probability formula of a two state system with dissipation is established. This formula allows on in particular to derive the general solution of a dissipative two-level system in the adiabatic limit which is valid beyond weak dissipation regimes.

Key words : Quantum control, adiabatic passage, parallel adiabatic passage, DDP formula, Stokes lines, dissipative systems.