

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DE JIJEL
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



N° d'ordre :

Série :

MEMOIRE

présenté pour obtenir le diplôme de

MAGISTER

Spécialité : Physique théorique

Option : Physique théorique

Par

NASREDDINE ZAGHOU

THEME

Supersymétrie et PT symétrie en mécanique quantique

Soutenu le :/...../2000

Devant le Jury :

Président :	T. Boudjedaa	Prof.	Univ. Jijel
Rapporteur :	F. Benamira	M.C	Univ. M. Constantine
Examineurs :	M. Maamache	Prof	Univ. F. A. Sétif
	L. Guechi	Prof	Univ. M. Constantine
	Z. Belghobsi	M.C	Univ. Jijel



Remerciements

Mes remerciements vont premièrement à Dieu le tout puissant pour la volonté, la santé et la patience qu'il m'a données pour mener à terme ce mémoire.

Je tiens à remercier mon encadreur M. F. Benamira, Maître de conférence à l'université de Constantine, de m'avoir confié ce sujet et pour ses précieux conseils, sa compréhension, son soutien moral et sa disponibilité.

Mes vifs remerciements vont à M. T. Boujedaa, Professeur à l'université de Jijel, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury.

Je remercie également et sincèrement M. M. Maamache, Professeur à l'université de Sétif, M. L. Guechi, Professeur à l'université de Constantine et M^{elle} Z. Belghobsi, Maître de conférence à l'université de Jijel, pour l'intérêt qu'ils ont bien voulu porter à ce travail en acceptant de le juger.

Je remercie également tous les enseignants du département de physique théorique de l'université de Jijel, en particulier M. A. Boutaghou et M. A. Tilbi,....

La thèse a été préparée au laboratoire de physique théorique de l'université de Jijel, je tiens à remercier tous les responsables pour les facilités qu'ils m'ont accordées.

Je remercie également tous les enseignants de la post-graduation de physique théorique ainsi que mes collègues étudiants de la promotion 2004/2007.

Enfin, je remercie ma famille, en particulier mon grand frère "L", mes proches et mes amis qui ont toujours cru en moi et m'ont toujours soutenu, et plus précisément ma mère et mon père qui m'ont toujours soutenu et encouragé au cours de la préparation de ce travail.

Nasreddine

Table des matières

Introduction	4
1 Supersymétrie en mécanique quantique	8
1.1 Introduction	8
1.2 Définition de la mécanique quantique supersymétrique	9
1.2.1 Définition-1 :	9
1.2.2 Définition-2	10
1.3 Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension par la méthode supersymétrique	11
1.3.1 Valeurs propres et fonctions propres des partenaires H_0 et H_1	13
1.3.2 Brisure de symétrie	14
1.3.3 Relation entre les valeurs propres et fonctions propres correspondantes de deux Hamiltoniens partenaires	15
1.4 Factorisation et Hiérarchie d'Hamiltoniens partenaires	17
1.5 Invariance de forme	23
1.5.1 Forme de la fonction f	26
2 Symétrie CPT et nouvelle théorie quantique	28
2.1 Introduction :	28
2.2 Propriétés des Hamiltoniens PT symétriques	29
2.2.1 Réalité des valeurs propres d'un Hamiltonien PT symétrique	29
2.2.2 Fonctions propres et espace de Hilbert	30
2.3 Nouvelle symétrie pour les Hamiltoniens PT symétriques	32

2.3.1	Construction de l'opérateur C	33
3	Etude par la supersymétrie d'une famille de potentiels centraux, singuliers et Hermitiens	35
3.1	Introduction	35
3.2	Conditions pour l'existence d'états liés	37
3.3	Propriétés de l'état fondamental conditionnel	38
3.3.1	Propriétés de l'état fondamental pour $p < 1$	40
3.3.2	Exemple illustratif	42
3.3.3	Propriétés de l'état fondamental pour $p > 1$	43
3.3.4	Exemple illustratif	44
3.4	Invariance de forme et propriétés du premier état excité	45
3.4.1	Propriétés du premier état excité pour $p < 1$	46
3.4.2	Exemple illustratif	48
3.4.3	Propriétés du premier état excité pour $p > 1$	49
3.4.4	Exemple illustratif	51
4	Etude par la supersymétrie d'une famille de potentiels singuliers, PT symétriques	52
4.1	Introduction	52
4.2	Approche de la supersymétrie pour les potentiels PT symétriques	53
4.3	Supersymétrie et Brisure de la symétrie PT	55
4.4	Construction d'une famille de potentiels PT symétriques	57
4.5	Recherche de valeurs propres et fonctions propres	58
4.5.1	Caractéristiques de l'état fondamental conditionnel	58
4.5.2	Exemples illustratifs	61
5	Etude de la symétrie CPT pour des Hamiltoniens à trois et quatre niveaux d'énergie	64
5.1	Introduction	64
5.2	Etude d'un Hamiltonien PT symétrique à trois niveaux	65

5.2.1	Présentation du modèle	65
5.2.2	Symétrie PT pour l'Hamiltonien choisi	66
5.2.3	Valeurs propres et états propres de $H(\theta)$	67
5.2.4	Valeurs propres et états propres de $H^+(\theta)$	70
5.2.5	Relations de bi-orthogonalisation et de fermeture	70
5.2.6	Opérateur C et symétrie CPT	72
5.2.7	Norme d'un vecteur via la symétrie CPT	75
5.2.8	Expression explicite de l'opérateur C	75
5.3	Etude d'un Hamiltonien PT symétrique à quatre niveaux	77
5.3.1	Présentation du modèle	77
5.3.2	Symétrie PT de l'Hamiltonien choisi	78
5.3.3	Valeurs propres et états propres de $H(\theta)$	78
5.3.4	Valeurs propre et états propres de $H^+(\theta)$	79
5.3.5	Relations de bi-orthogonalisation et de fermeture	79
5.3.6	Opérateur C et symétrie CPT	81
5.3.7	Expression explicite de l'opérateur C	82
	Conclusion et perspectives	84
	A Rappels sur les symétries discrètes en mécanique quantique	86
	A.0.8 Parité en mécanique quantique	88
	A.0.9 Renversement du temps en mécanique quantique	91

Introduction

La mécanique quantique est à la base de toutes les théories modernes décrivant les phénomènes physiques qui se manifestent à l'échelle atomique, où à basse température pour les systèmes constitués d'un très grand nombre de particules. Le point de départ est bien sûr la détermination du spectre énergétique de l'Hamiltonien qui décrit la dynamique du système en question. Pour cela, il faut passer impérativement par la résolution de l'équation de Schrödinger relative à cet Hamiltonien. Pour un système à n degrés de libertés, gouverné par un Hamiltonien H , cette équation s'écrit :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t) = H \Psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t). \quad (1)$$

Si l'opérateur Hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps, il est d'usage de mettre la fonction d'onde $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t)$ sous la forme d'un produit d'une fonction de l'espace et d'une autre fonction du temps, $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n; t) = \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) \Xi(t)$, de sorte que la résolution de cette équation se réduit à la résolution d'une équation aux valeurs propres pour la fonction Φ ,

$$H \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n) = E \Phi(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (2)$$

appelée aussi équation de Schrödinger stationnaire.

Lorsque le système étudié ne subit pas l'effet d'un champ magnétique, l'Hamiltonien H est généralement composé d'une partie cinétique et d'un potentiel d'interaction. Dans le cas d'une seule particule placée dans un potentiel scalaire, l'Hamiltonien prend la forme

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + v(\mathbf{r}), \quad (3)$$

où Δ désigne le Laplacien et $v(\mathbf{r})$ est la fonction du potentiel.

Ainsi, la recherche de méthodes ou approches générales de résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire ou dépendante du temps a toujours intéressé et les physiciens et les mathématiciens. Il existe maintenant plusieurs techniques, qui sont au fond équivalentes mais, dont chacune peut être plus ou moins adaptée pour certains types de potentiels. La méthode des intégrales de chemin a été utilisée avec succès pour résoudre pratiquement tous les potentiels connus en physique et a montré son efficacité même pour les potentiels dépendants du temps. Une autre technique basée sur la transformation de l'équation de Schrödinger stationnaire en une équation de Sturm-Liouville du type hypergéométrique est aussi souvent utilisée dans la littérature. L'avantage de cette méthode est que les fonctions propres et valeurs propres correspondantes sont données sous formes compactes.

Parallèlement à ces techniques, la méthode de factorisation est connue depuis les travaux de Schrödinger lui-même [1]. Elle a connu un développement notable dans les années quarante grâce aux travaux de Infeld et Hull [2]. Depuis quelques années il y a eu un regain d'intérêt pour cette technique [3] et notamment depuis l'introduction de la notion de l'invariance de forme d'un potentiel par Gendeshstein [4]. Cette méthode est maintenant connue sous le nom de méthode supersymétrique ou supersymétrie en mécanique quantique. Le point essentiel dans cette approche est l'obtention d'un potentiel supersymétrique, par la résolution d'une équation du type Riccati, à partir duquel on détermine la fonction propre de l'état fondamental, supposé d'énergie nulle. Les autres valeurs propres et fonctions propres du potentiel sont alors déterminées d'une manière simple et élégante. L'avantage de cette méthode est beaucoup plus sa simplicité par rapport aux autres approches. Cependant, elle demeure restrictive puisqu'elle s'applique uniquement pour les potentiels invariants de forme.

Dans les toutes dernières années, on a commencé à s'intéresser à l'élaboration d'une nouvelle théorie quantique qui pourrait s'appliquer aux potentiels non Hermitiens, mais invariants par la réflexion de l'espace et le renversement du temps. Elle est parfois appelée mécanique quantique PT symétrique. On montre que si le potentiel est PT symétrique et que la symétrie n'est pas brisée, les valeurs propres de l'Hamiltonien sont réelles [5, 6, 7, 8, 9]. Evidemment, cette propriété est essentielle si on veut que les Hamiltoniens PT symétriques décrivent les dynamiques de systèmes physiques. L'intérêt de cette nouvelle théorie est qu'elle peut être appliquée pour

étudier les systèmes physiques dissipatifs, où le potentiel d'interaction est souvent représenté par une fonction complexe.

Le problème essentiel qui a entravé l'acceptation de cette nouvelle théorie, par la communauté des physiciens, comme une alternative à la mécanique quantique Hermitienne est le fait qu'une partie des fonctions propres qui émergent de la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire sont de normes négatives. Ce résultat signifie bien sûr que la probabilité de présence n'est pas définie positive et par conséquent il ne peut être accepté physiquement. Récemment, on a montré qu'en fait tout Hamiltonien PT symétrique possède une autre symétrie cachée qui, si elle est prise en considération, toutes les fonctions propres sont alors définies positives. En effet, on montre qu'il existe un opérateur C (appelé parfois opérateur de conjugaison de charge) commutant avec l'Hamiltonien et qui transforme les fonctions de ce dernier dont les normes sont négatives en d'autres fonctions propres de normes positives. Ainsi, on continue à espérer qu'on pourrait bâtir une nouvelle théorie quantique plus générale que celle qu'on a entre les mains, qui serait capable de décrire la dynamique des systèmes régis par des Hamiltonien non forcément Hermitiens.

Le travail de ce mémoire de Magistère s'articule sur les thèmes cités plus haut. Dans le chapitre 1, nous développons en bref l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique pour un potentiel à une dimension possédant des états liés. En considérant la notion d'invariance de forme, on dérive l'expression générale de l'énergie du $n^{\text{ième}}$ état ainsi que la fonction propre correspondante.

Le chapitre 2 est consacré à une brève présentation des propriétés des Hamiltoniens non Hermitiens et invariants par renversement du temps et inversion de l'espace. On y trouve les développements récents qui tentent de mettre sur pieds les fondements et bases d'une nouvelle théorie quantique pour cette classe d'Hamiltoniens.

Le travail original, réalisé dans ce mémoire, fait l'objet des chapitres 3, 4 et 5. Dans le chapitre 3, nous avons utilisé l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique pour résoudre partiellement (conditionnellement) le problème de l'équation aux valeurs propres d'une famille générale de potentiels centraux singuliers. Nous montrons que pour des choix particuliers des paramètres ajustables, il est possible de déterminer les caractéristiques de l'état fondamental du potentiel et parfois du premier niveau excité aussi. Pour certains choix des paramètres, nous

montrons comment la notion que l'invariance de forme conditionnelle peut être exploitée pour déterminer dans certains cas les caractéristiques du premier niveau excité. Certains résultats connus dans la littérature sont alors retrouvés comme cas particuliers.

Dans le chapitre 4, nous avons utilisé de nouveau l'approche de la supersymétrie en mécanique quantique pour analyser, dans un cadre restreint, les spectres et les fonctions propres des potentiels du chapitre 3 mais avec des paramètres complexes. Le choix des paramètres est fait de telle sorte que les potentiels étudiés soient PT symétriques. Nous avons montré que, en conformité avec la théorie générale, les énergies qu'on peut calculer sont effectivement réelles et que les fonctions propres correspondantes peuvent avoir des normes négatives.

Le chapitre 5 est réservé à la résolution de l'équation de Schrödinger pour des Hamiltoniens PT symétriques à trois et quatre niveaux, représentés par des matrices 3×3 et 4×4 . Nous calculons dans chaque cas l'opérateur de conjugaison de charge C et nous en déduisons les fonctions propres communes à H et CPT . Nous montrons que ces dernières sont bien de normes positives. Nous terminons ce travail par une conclusion générale et quelques perspectives.

Chapitre 1

Supersymétrie en mécanique quantique

1.1 Introduction

La supersymétrie (*SUSY*) est venue comme résultat aux efforts des physiciens pour obtenir une description commune pour toutes les interactions de base de la nature. Elle combine les degrés de liberté bosonique et fermionique dans une description élégante en fonction de superchamps [3]. Autrement dit, la supersymétrie en physique est la description de la symétrie entre les bosons et les fermions, en ce sens que chaque fermion a un “superpartenaire” qui est un boson et vice versa. Naïvement, on peut dire que la *SUSY* non brisée mène à une dégénérescence entre les spectres des fermions et bosons dans une théorie commune.

Ce formalisme a vu le jour au début des années (1970) avec les travaux de *Nicolai* [10] et *Witten* [11] sur l’unification de la théorie de champs, dont les idées fondamentales ont stimulé de nouvelles approches dans d’autres branches de la physique, telles que la physique atomique, moléculaire, nucléaire, statistique et physique de la matière condensée et fondamentalement en mécanique quantique non relativiste. Dans cette dernière branche, la supersymétrie est une approche pour la résolution algébrique de l’équation de Schrödinger pour les états liés d’une certaine classe de potentiels dits invariants de forme. Elle peut aussi, servir pour générer de nouveaux potentiels exactement solubles dont les spectres et les fonctions propres associées sont liés à ceux d’un potentiel de référence.

Quand on a commencé à étudier les différents aspects de la mécanique quantique supersymétrique, "supersymmetric quantum mechanics (*SUSYQM*)", il était déjà clair que ce champ est intéressant non seulement comme modèle pour tester les méthodes de la théorie des champs mais il était évident que son application à la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire constitue une ramification de la méthode de factorisation qui fut initiée par Schrödinger lui-même et développée plus tard par Infeld et Hull [2]. Graduellement, les bases de la *SUSYQM* se sont développées avec les travaux de Cooper, Junker et essentiellement ceux de Gendeshstein [4], qui ont conduit à la découverte d'une multitude de potentiels analytiquement solubles.

De façon générale, dans la *SUSY*, on considère la réalisation simple d'une algèbre supersymétrique impliquant des opérateurs bosoniques et fermioniques satisfaisant respectivement des relations de commutation et d'anticommutation. Cette algèbre est fermée sous une combinaison de relations de commutation et anti-commutation. On peut donc voir la *SUSY* comme une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger [12], basée sur une nouvelle approche purement algébrique. En outre, les méthodes de la *SUSY* qui incluent le concept de l'invariance de forme sont ensembles des reformulations de l'idée de *Riccati* concernant l'utilisation de l'équivalence entre les solutions de l'équation de *Riccati* et l'équation différentielle linéaire de deuxième ordre.

1.2 Définition de la mécanique quantique supersymétrique

Considérons un système quantique caractérisé par un hamiltonien H , agissant sur un certain espace de Hilbert R et postulons l'existence d'un ensemble d'opérateurs Q_i , $i = 1, 2, 3, \dots, N$, appelés supercharges, et leurs adjoints qui agissent aussi sur R .

1.2.1 Définition-1 :

Si les opérateurs Q_i satisfont les relations de commutation

$$[Q_i, H] = 0, \tag{1.1}$$

avec H et les relations d'anticommutation

$$\{Q_i, Q_j\} = \delta_{ij} H, \quad (1.2)$$

entre eux, où δ_{ij} est le symbole de Kronecker, on dit que H est un Hamiltonien supersymétrique.

1.2.2 Définition-2

Un système quantique supersymétrique est dit possédant une bonne *SUSY* (non brisée) si l'énergie de son état fondamental est nulle, $E_0 = 0$. Si elle est strictement positive, c'est-à-dire $E_0 > 0$, on dit que la *SUSY* est brisée [13, 14].

Pour fixer les idées, considérons un système avec deux opérateurs Q_1 et Q_2 , Alors l'opérateur

$$Q = \frac{Q_1 + iQ_2}{\sqrt{2}}, \quad (1.3)$$

et son adjoint

$$Q^+ = \frac{Q_1 - iQ_2}{\sqrt{2}}, \quad (1.4)$$

vérifient l'algèbre

$$H = \{Q, Q^+\}, \quad Q^2 = Q^{+2} = 0 \quad (1.5)$$

De ces équations, il découle que

$$[Q, H] = 0 \text{ et } [Q^+, H] = 0. \quad (1.6)$$

C'est-à-dire, l'opérateur de supercharge Q est *nilpotent* et commute avec l'Hamiltonien H . Un exemple simple de l'algèbre définie par (1.5) peut être réalisé en considérant

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ A & 0 \end{pmatrix}, \quad Q^+ = \begin{pmatrix} 0 & A^+ \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

où A est un opérateur donné et A^+ son adjoint. Il est clair que Q^2 et Q^{+2} sont identiquement

nuls. Les relations (1.5) et (1.7) mènent à l'Hamiltonien supersymétrique

$$H = \begin{pmatrix} A^+A & 0 \\ 0 & AA^+ \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

On peut dire que les opérateurs Q et Q^+ induisent des transformations entre le secteur bosonique et le secteur fermionique, alors on a le schéma suivant

$$\begin{array}{ccc} & Q^+ & \\ \text{Boson} & \xleftarrow{\quad} & \text{fermion} \\ & \xrightarrow{\quad} & \end{array} \quad (1.9)$$

1.3 Résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension par la méthode supersymétrique

L'Hamiltonien d'une particule quantique en mouvement à une dimension sous l'effet du potentiel scalaire $v(x)$ s'écrit

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + v(x); \quad \hbar = 2m = 1. \quad (1.10)$$

Si le potentiel satisfait aux conditions de confinement, la particule peut avoir des états stationnaires $\Psi_n(x)$ d'énergies quantifiées E_n , qui sont les solutions de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + v(x) \right] \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x), \quad n = 0, 1, \dots \quad (1.11)$$

Le nombre de ces états peut être fini ou infini selon l'allure du potentiel. Par ailleurs, il est bien établi qu'à une dimension il n'existe pas de dégénérescence; autrement dit, à chaque valeur de l'énergie correspond une seule fonction propre. Ainsi, nous allons classer les énergies E_n par ordre croissant, de sorte que E_0 est la plus basse énergie (énergie de l'état fondamental $\Psi_n(x)$),

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots$$

La *SUSYQM* repose sur l'ansatz de factorisation de l'Hamiltonien. On construit deux

Hamiltoniens H_0 et H_1 , (dénotés parfois aussi H_- et H_+) dits partenaires comme

$$H_0 = -\frac{d^2}{dx^2} + v_0(x) = A_0^+ A_0 \quad (1.12)$$

et

$$H_1 = -\frac{d^2}{dx^2} + v_1(x) = A_0 A_0^+, \quad (1.13)$$

avec A_0 donné par

$$A_0 = \frac{d}{dx} + W_0(x), \quad (1.14)$$

et A^+ est son hermitique adjoint. La fonction $W_0(x)$, appelée super potentiel, est reliée au potentiel $v(x)$ et à l'énergie de son état fondamental E_0 par l'équation différentielle non linéaire

$$\begin{aligned} W_0^2(x) - W_0'(x) &= v(x) - E_0 \\ &= v_0(x), \end{aligned} \quad (1.15)$$

ou encore

$$\begin{aligned} W_0^2(x) + W_0'(x) &= v_1(x) \\ &= v_0(x) + 2W_0'(x). \end{aligned} \quad (1.16)$$

L'équation de Schrödinger pour les partenaires H_0 et H_1 s'écrit :

$$A_0^+ A_0 \Psi_n^{(0)}(x) = E_n^{(0)} \Psi_n^{(0)}(x), \quad (1.17)$$

et

$$A_0 A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x) = E_n^{(1)} \Psi_n^{(1)}(x), \quad (1.18)$$

Ainsi, par construction, l'énergie de l'état fondamental de H_0 est nulle alors que les énergies des états excités sont toutes positives :

$$E_0^{(0)} = 0 \text{ et } E_n^{(0)} > 0, \text{ pour } n \geq 1. \quad (1.19)$$

Nous allons montrer dans les sections qui suivent que les valeurs propres du partenaire H_1 et les fonctions propres correspondantes se déduisent directement à partir de celles de H_0 par des relations simples.

1.3.1 Valeurs propres et fonctions propres des partenaires H_0 et H_1

Par construction, nous avons pour $n = 0$

$$\begin{aligned} H_0 \Psi_0^{(0)}(x) &= \left(-\frac{d^2}{dx^2} + v_0(x) \right) \Psi_0^{(0)}(x) \\ &= 0, \end{aligned} \tag{1.20}$$

de sorte que la fonction propre de l'état fondamental est reliée au potentiel par

$$v_0(x) = \frac{\frac{d^2}{dx^2} \Psi_0^{(0)}(x)}{\Psi_0^{(0)}(x)}. \tag{1.21}$$

Autrement dit, le potentiel $v_0(x)$ est complètement défini par la connaissance de la fonction propre du niveau fondamental et vice versa. (Notons que la fonction de l'état fondamental $\Psi_0^{(0)}(x)$ ne s'annule pas sur l'intervalle de définition du potentiel $v_0(x)$, voir cours élémentaire de mécanique quantique).

Par ailleurs, en multipliant les deux membres de l'équation (1.17) resp (1.18) par $\Psi_n^{*(0)}(x)$ resp $\Psi_n^{*(1)}(x)$ et intégrant sur tout l'espace, on obtient

$$\frac{\int |A_0 \Psi_n^{(i)}(x)|^2 dx}{\int |\Psi_n^{(i)}(x)|^2 dx} = E_n^{(i)}, \text{ pour } i = 0 \text{ ou } 1, \tag{1.22}$$

qui signifie que toutes les valeurs propres des partenaires sont positives ou nulles. Cependant, sachant que les valeurs propres d'un Hamiltonien à une dimension ne sont pas dégénérées, on en déduit le résultat (1.19). En particulier, pour $n = 0$, il découle que

$$A_0 \Psi_0^{(0)}(x) = 0, \tag{1.23}$$

et donc la fonction propre de l'état fondamental de H_0 est aussi fonction propre de A_0 avec la

valeur propre 0. De là, on obtient que

$$W_0(x) = -\frac{\Psi_n^{(0)'}(x)}{\Psi_n^{(0)}(x)}, \quad (1.24)$$

qui s'intègre pour donner la fonction propre de l'état fondamental sous la forme

$$\Psi_0^{(0)}(x) = N_0 \exp \left[-\int^x W(y) dy \right], \quad (1.25)$$

où N_0 est une constante de normalisation.

Ainsi, connaissant le superpotentiel $W_0(x)$, on peut en déduire directement la fonction propre de l'état fondamental de H_0 .

1.3.2 Brisure de symétrie

Avant de passer à la détermination des relations qui existent entre les fonctions propres et valeurs propres des deux partenaires, signalons au passage que la fonction propre de l'état fondamental (1.25) doit être physiquement acceptable, c'est-à-dire qu'elle doit satisfaire à la condition de normalisation. Ainsi, si $\Psi_0^{(0)}(x)$ est normalisable, on dit que la supersymétrie est non brisée et on continue la démarche comme ce qui va suivre dans les sections suivantes. En revanche si $\Psi_0^{(0)}(x)$ est une fonction non normalisable, on doit tout d'abord regarder la fonction propre de l'état fondamental du partenaire H_1 , qui sera donnée par

$$\begin{aligned} \Psi_0^{(1)}(x) &= N_1 \exp \left[\int^x W(y) dy \right] \\ &\sim \frac{1}{\Psi_0^{(0)}(x)}. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Si cette fonction est normalisable, alors la supersymétrie est non brisée mais il faudra considérer H_1 comme l'Hamiltonien principal et H_0 comme son partenaire, et poursuivre l'étude comme ce qui va suivre dans les prochaines sections.

Le problème se pose généralement lorsqu'aucune des deux fonctions $\Psi_0^{(0)}(x)$ et $\Psi_0^{(1)}(x)$ n'est normalisable. Dans ce cas, on dit qu'on a une supersymétrie brisée. Les procédures des sections suivantes ne s'appliqueront pas donc automatiquement. Dans la plupart des cas, le problème

ne sera pas résolu par les techniques de la *SUSYQM* et il faudra utiliser d'autres méthodes alternatives. Cependant, il existe des cas de supersymétrie brisée qui pourront être traités par l'approche *SUSYQM* après avoir éliminer la brisure par des techniques spécifiques.

1.3.3 Relation entre les valeurs propres et fonctions propres correspondantes de deux Hamiltoniens partenaires

A partir de maintenant nous supposons que le problème étudié caractérisé par le potentiel $v_0(x)$, n'est pas à symétrie brisée.

Pour trouver les relations entre les valeurs propres et fonctions propres des partenaires, nous considérons que les énergies propres des deux partenaires sont classées dans un ordre croissant, i.e :

$$E_{n+1}^{(i)} > E_n^{(i)} \text{ pour } i = 0, 1. \quad (1.27)$$

Partons de l'égalité (1.17) et appliquons l'opérateur A_0 à gauche des deux membres. Sachant que le produit des opérateurs linéaires agissant sur le même espace de Hilbert est associatif, il vient

$$A_0 A_0^+ (A_0 \Psi_n^{(0)}(x)) = E_n^{(0)} (A_0 \Psi_n^{(0)}(x)), \quad (1.28)$$

qui s'écrit

$$H_1 (A_0 \Psi_n^{(0)}(x)) = E_n^{(0)} (A_0 \Psi_n^{(0)}(x)), \quad (1.29)$$

Ainsi, si $A_0 \Psi_n^{(0)}(x) \neq 0$, c'est-à-dire pour $n \neq 0$, il découle que cette fonction est fonction propre de H_1 avec la valeur propre $E_n^{(0)}$.

De la même manière, en agissant sur les deux membres de (1.18) à gauche par A_0^+ , on obtient

$$A_0^+ A_0 (A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x)) = E_n^{(1)} (A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x)), \quad (1.30)$$

ou encore

$$H_0 (A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x)) = E_n^{(1)} (A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x)). \quad (1.31)$$

Donc, si $A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x) \neq 0$, $E_n^{(1)}$ est aussi valeur propre de H_0 pour la fonction propre $(A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x))$.

Conséquemment, toutes les valeurs propres de H_0 , à l'exception de $E_0^{(0)}$, sont aussi des

valeurs propre de H_1 , i.e : H_0 et H_1 possèdent le même spectre énergétique sauf pour l'énergie de l'état fondamental $E_0^{(0)}$, qui ne fait pas partie du spectre de H_1 . Puisque les spectres vérifient la relation (1.27), on obtient la relation entre les $E_n^{(1)}$ et $E_n^{(0)}$ sous la forme

$$E_{n+1}^{(0)} = E_n^{(1)} \text{ pour } n \geq 1, \text{ et } E_0^{(0)} = 0. \quad (1.32)$$

On peut dresser le schéma suivant :

$$\begin{array}{ccc} H_0 & & H_1 \\ E_2^{(0)} & \text{-----} \vec{A} \text{-----} & E_1^{(1)} \\ E_1^{(0)} & \text{-----} A^+ \text{-----} & E_0^{(1)} \\ E_0^{(0)} & \text{-----} & \end{array}$$

Action des opérateurs A_0 et A_0^+

En comparant (1.18) et (1.29), on obtient la relation entre les fonctions propres de H_0 et H_1 sous la forme

$$\Psi_n^{(1)}(x) = N_n A_0 \Psi_{n+1}^{(0)}(x), \quad (1.33)$$

où N_n est une constante de normalisation, supposée réelle.

Si les $\Psi_n^{(1)}(x)$ et $\Psi_{n+1}^{(0)}(x)$ sont normalisées à 1, à partir de l'équation (1.33) on peut écrire

$$\begin{aligned} \int \Psi_n^{*(1)}(x) \Psi_n^{(1)}(x) dx &= N_n^2 \int \Psi_{n+1}^{*(0)}(x) A_0^+ A_0 \Psi_{n+1}^{(0)}(x) dx \\ &= N_n^2 E_{n+1}^{(0)} \int \Psi_{n+1}^{*(0)}(x) \Psi_{n+1}^{(0)}(x) dx, \end{aligned} \quad (1.34)$$

et par conséquent on obtient

$$N_n = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(0)}}}. \quad (1.35)$$

On peut donc écrire explicitement

$$\Psi_n^{(1)}(x) = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(0)}}} A_0 \Psi_{n+1}^{(0)}(x), \quad (1.36)$$

et

$$\Psi_{n+1}^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(1)}}} A_0^+ \Psi_n^{(1)}(x). \quad (1.37)$$

Alors, on déduit que l'opérateur A_0 resp (A_0^+) transforme la fonction propre de H_0 resp (H_1) en une fonction propre de H_1 resp (H_0). Ceci, veut dire que si l'on connaît toutes les fonctions propres de H_0 , on peut déterminer celles de H_1 et vice versa, par application répétée de A_0 ou A_0^+ . A chaque étape, la fonction propre obtenue est de carré sommable avec la même valeur propre.

Donc, la première conclusion à tirer de la supersymétrie et qu'elle peut servir pour obtenir de nouveaux potentiels solubles. En effet, à partir des fonctions propres et valeurs propres de H_0 on peut obtenir ceux du partenaire H_1 dont le potentiel $v_1(x)$ est relié à $v_0(x)$ par (1.16) mais dont les allures peuvent avoir des forme totalement différentes.

1.4 Factorisation et Hiérarchie d'Hamiltoniens partenaires

Dans la section précédente on a vu qu'une fois la fonction propre de l'état fondamental correspondant à un Hamiltonien H_0 est connue, on peut construire le super potentiel $W_0(x)$ et vice versa. Ainsi l'Hamiltonien H_0 peut être factorisé comme le produit des opérateurs A_0 et A_0^+ sous la forme (1.12) et on peut lui associer un partenaire H_1 . Le spectre et les fonctions propres correspondantes de ce dernier sont complètement déduites à partir de ceux de H_0 .

De la même manière, connaissant la fonction propre de l'état fondamental de H_1 , on peut obtenir un nouveau superpotentiel $W_1(x)$, à partir duquel on construit aussi deux nouveaux opérateurs A_1 et A_1^+ . Ces derniers serviront pour factoriser H_1 comme $H_1 = A_1^+ A_1$ et définir son partenaire comme $H_2 = A_1 A_1^+$. Cette procédure peut être poursuivie successivement pour construire une hiérarchie d'Hamiltoniens partenaires $H_0, H_1, \dots, H_m, \dots$ dont les spectres et les fonctions propres correspondantes sont reliés par des relations semblables. Nous allons développer ceci dans ce qui suit.

Soit donc l'Hamiltonien de départ H_0 et admettons qu'il dépend explicitement d'un ensemble de paramètres réels, décrits par a_0 . Admettons aussi que l'énergie de son état fondamental

$E_0^{(0)}(a_0)$ et la fonction propre correspondante $\Psi_0^{(0)}(x, a_0)$ sont connues. On peut donc écrire

$$\begin{aligned} H_0(x, a_0) &= -\frac{d^2}{dx^2} + v_0(x, a_0) \\ &= A_0^+(a_0) A_0(a_0) + E_0^{(0)}(a_0), \end{aligned} \quad (1.38)$$

avec

$$\begin{cases} A_0^+(x, a_0) = -\frac{d}{dx} + W_0(x, a_0) \\ A_0(x, a_0) = \frac{d}{dx} + W_0(x, a_0) \end{cases}, \quad (1.39)$$

et

$$W_0(x, a_0) = -\frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(0)}(x, a_0). \quad (1.40)$$

Le partenaire supersymétrique est donné par

$$\begin{aligned} H_1(x, a_0) &= -\frac{d^2}{dx^2} + v_1(x, a_0) \\ &= A_0(a_0) A_0^+(a_0) + E_0^{(0)}(a_0), \end{aligned} \quad (1.41)$$

avec

$$\begin{aligned} v_1(x, a_0) &= W_0^2(x, a_0) + W_0'(x, a_0) + E_0^{(0)}(a_0) \\ &= v_0(x, a_0) + 2W_0'(x, a_0) \\ &= v_0(x, a_0) - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \Psi_0^{(0)}(x, a_0). \end{aligned} \quad (1.42)$$

A partir des équations (1.32), (1.36) et (1.37), les énergies propres et les fonctions propres correspondantes sont reliées par

$$E_{n+1}^{(0)}(a_0) = E_n^{(1)}(a_0), \quad (1.43)$$

et

$$\begin{cases} \Psi_n^{(1)}(x, a_0) = \frac{1}{\sqrt{E_{n+1}^{(0)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)}} A_0(a_0) \Psi_{n+1}^{(0)}(x, a_0), \\ \Psi_{n+1}^{(0)}(x, a_0) = \frac{1}{\sqrt{E_n^{(1)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)}} A_0^+(a_0) \Psi_n^{(1)}(x, a_0). \end{cases} \quad (1.44)$$

Maintenant, on peut refactoriser H_1 , dont l'énergie de l'état fondamental est $E_0^{(1)}(a_0) =$

$E_1^{(0)}(a_0)$, pour déterminer son partenaire H_2 , et ensuite on peut écrire H_1 sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} H_1(x, a_0) &= A_0(x, a_0) A_0^+(x, a_0) + E_0^{(0)}(a_0) \\ &= A_1^+(x, a_0) A_1(x, a_0) + E_0^{(1)}(a_0), \end{aligned} \quad (1.45)$$

avec

$$\begin{cases} A_1^+(x, a_0) = -\frac{d}{dx} + W_1(x, a_0), \\ A_1(x, a_0) = -\frac{d}{dx} + W_1(x, a_0), \end{cases} \quad (1.46)$$

où

$$W_1(x, a_0) = -\frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(1)}(x, a_0). \quad (1.47)$$

Le nouveau partenaire de H_1 sera défini par

$$\begin{aligned} H_2(x, a_0) &= -\frac{d^2}{dx^2} + v_2(x, a_0) \\ &= A_1(x, a_0) A_1^+(x, a_0) + E_1^{(0)}(a_0), \end{aligned} \quad (1.48)$$

alors la forme de $v_2(x, a_0)$ est donnée par

$$\begin{aligned} v_2(x, a_0) &= W_1^2(x, a_0) + W_1'(x, a_0) + E_1^{(0)}(a_0) \\ &= v_1(x, a_0) - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \Psi_0^{(1)}(x, a_0) \\ &= v_0(x, a_0) - 2\frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\Psi_0^{(0)}(x, a_0) \Psi_0^{(1)}(x, a_0) \right). \end{aligned} \quad (1.49)$$

Par ailleurs, on a

$$E_n^{(2)}(a_0) = E_{n+1}^{(1)}(a_0) = E_{n+2}^{(0)}(a_0), \quad (1.50)$$

et

$$\Psi_n^{(2)}(x, a_0) = \frac{A_1(a_0) \Psi_{n+1}^{(1)}(x, a_0)}{\sqrt{E_{n+1}^{(1)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0)}} \quad (1.51)$$

ou bien

$$\Psi_n^{(2)}(x, a_0) = \frac{A_1(a_0) A_0(a_0) \Psi_{n+2}^{(0)}(x, a_0)}{\sqrt{\left(E_{n+2}^{(0)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0) \right) \left(E_{n+2}^{(0)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0) \right)}}. \quad (1.52)$$

L'inversion des relations (1.51) et (1.52) donne

$$\Psi_{n+1}^{(1)}(x, a_0) = \frac{A_1^+(a_0) \Psi_n^{(2)}(x, a_0)}{\sqrt{E_n^{(2)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0)}}, \quad (1.53)$$

et

$$\Psi_{n+2}^{(0)}(x, a_0) = \frac{A_0^+(a_0) A_1^+(a_0) \Psi_n^{(2)}(x, a_0)}{\sqrt{(E_n^{(2)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)) (E_n^{(2)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0))}}. \quad (1.54)$$

La refactorisation de H_2 pour déterminer son partenaire H_3 conduit à définir $A_2(x, a_0)$ et son hermitique adjoint, de sorte que

$$H_2(x, a_0) = A_2^+(x, a_0) A_2(x, a_0) + E_2^{(0)}(a_0). \quad (1.55)$$

Il s'ensuit que

$$\begin{cases} A_2^+(x, a_0) = -\frac{d}{dx} + W_2(x, a_0), \\ A_2(x, a_0) = \frac{d}{dx} + W_2(x, a_0), \end{cases} \quad (1.56)$$

avec

$$W_2(x, a_0) = -\frac{d}{dx} \ln \Psi_0^{(2)}(x, a_0). \quad (1.57)$$

Le partenaire H_3 est alors donné par

$$\begin{aligned} H_3(x, a_0) &= -\frac{d^2}{dx^2} + v_3(x, a_0) \\ &= A_2(x, a_0) A_2^+(x, a_0) + E_2^{(0)}(a_0), \end{aligned} \quad (1.58)$$

avec

$$v_3(x, a_0) = v_0(x, a_0) - 2 \frac{d^2}{dx^2} \ln \left(\Psi_0^{(0)}(x, a_0) \Psi_0^{(1)}(x, a_0) \Psi_0^{(2)}(x, a_0) \right), \quad (1.59)$$

tel que

$$E_n^{(3)}(a_0) = E_{n+1}^{(2)}(a_0) = E_{n+2}^{(1)}(a_0) = E_{n+3}^{(0)}(a_0), \quad (1.60)$$

et

$$\Psi_n^{(3)}(x, a_0) = F \Psi_{n+3}^{(0)}(x, a_0), \quad (1.61)$$

avec

$$F = \frac{A_2(a_0) A_1(a_0) A_0(a_0)}{\sqrt{\left(E_{n+3}^{(0)}(a_0) - E_0^{(2)}(a_0)\right) \left(E_{n+3}^{(0)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0)\right) \left(E_{n+3}^{(0)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)\right)}}. \quad (1.62)$$

Et la relation inversée de cette équation est donnée par

$$\Psi_{n+3}^{(0)}(x, a_0) = \chi \Psi_n^{(3)}(x, a_0) \quad (1.63)$$

avec

$$\chi = \frac{A_0^+(a_0) A_1^+(a_0) A_2^+(a_0)}{\sqrt{\left(E_n^{(3)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)\right) \left(E_n^{(3)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0)\right) \left(E_n^{(3)}(a_0) - E_0^{(2)}(a_0)\right)}}. \quad (1.64)$$

Puis, on refactorise H_3 pour déterminer son partenaire H_4 et ainsi de suite. Alors, de façon générale, si H_0 possède p états liés, on peut poursuivre cette procédure jusqu'à l'ordre p et construire une hiérarchie de $p - 1$ partenaires H_m (avec $m = 1, 2, 3, \dots, p$) à partir de H_0 . Chaque Hamiltonien H_m possède $(p - m)$ états liés de valeurs propres $E_n^{(0)}$ et de fonctions propres $\Psi_n^{(0)}$ avec $[m \leq n \leq p]$. Autrement dit, H_m ne possède pas les m premières valeurs propres de H_0 [3]. Si la symétrie se brise à une étape quelconque de la construction de cette hiérarchie, on ne peut pas aller plus loin et on doit s'arrêter à ce niveau. Ainsi, si la symétrie n'est pas brisée à l'étape m , l'Hamiltonien correspondant H_m sera donné par

$$\begin{aligned} H_m(x, a_0) &= -\frac{d^2}{dx^2} + v_m(x, a_0) \\ &= A_m^+(a_0) A_m(a_0) + E_m^{(0)}(a_0), \end{aligned} \quad (1.65)$$

où

$$\begin{cases} A_m^+(a_0) = -\frac{d}{dx} + W_m(x, a_0) \\ A_m(a_0) = \frac{d}{dx} + W_m(x, a_0) \end{cases}, \quad (1.66)$$

avec

$$W_m(x, a_0) = -\frac{\Psi_0^{(m)'}(x)}{\Psi_0^{(m)}(x)} = -\frac{d \ln \Psi_0^{(m)}(x, a_0)}{dx}. \quad (1.67)$$

La forme de $v_m(x, a_0)$ est donnée par

$$v_m(x, a_0) = v_0(x, a_0) - 2 \frac{d^2 \ln \left(\Psi_0^{(0)}(x, a_0) \cdots \Psi_0^{(m-1)}(x, a_0) \right)}{dx^2}. \quad (1.68)$$

On a aussi

$$E_n^{(m)}(a_0) = E_{n+1}^{(m-1)}(a_0) = \cdots = E_{n+m}^{(0)}(a_0), \quad (1.69)$$

et

$$\Psi_n^{(m)}(x, a_0) = \zeta \Psi_{n+m}^{(0)}(x, a_0), \quad m \geq 1, \quad (1.70)$$

avec

$$\zeta = \frac{A_{m-1}(a_0) \cdots A_1(a_0) A_0(a_0)}{\sqrt{\left(E_{n+m}^{(0)}(a_0) - E_0^{(m-1)}(a_0) \right) \cdots \left(E_{n+m}^{(0)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0) \right) \left(E_{n+m}^{(0)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0) \right)}}. \quad (1.71)$$

La relation inverse de cette équation est donnée par

$$\Psi_{n+m}^{(0)}(x, a_0) = \varphi \Psi_n^{(m)}(x, a_0), \quad (1.72)$$

avec

$$\varphi = \frac{A_0^+(a_0) A_1^+(a_0) \cdots A_{m-1}^+(a_0)}{\sqrt{\left(E_n^{(m)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0) \right) \left(E_n^{(m)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0) \right) \cdots \left(E_n^{(m)}(a_0) - E_0^{(m-1)}(a_0) \right)}}. \quad (1.73)$$

Aussi, on peut écrire

$$v_m(x, a_0) = v_0(x, a_0) - 2 \frac{d^2 \ln \left(\Psi_0^{(0)}(x, a_0) \cdots \Psi_0^{(m-1)}(x, a_0) \right)}{dx^2}. \quad (1.74)$$

Enfin, si l'on connaît toutes les énergies propres et fonctions propres de H_0 , on peut déduire celles des autres Hamiltoniens H_m .

1.5 Invariance de forme

En 1983, le concept de potentiels invariants de forme, "shape invariance potentiels" (*SIP*) en anglais, dans la structure de la mécanique quantique supersymétrique, a été introduit par Gendeshstein [4]. Comme on va le voir, quand cette propriété est satisfaite par un potentiel, il est aisé de déterminer son spectre d'une manière algébrique, simple et élégante. Autrement dit, l'invariance de forme peut être considérée comme une condition suffisante pour la solvabilité d'un potentiel mais elle n'est toutefois pas une condition nécessaire [3].

Maintenant, si $v_0(x, a_0)$ est un potentiel supersymétrique dépendant d'un ensemble de paramètres a_0 , on dit qu'il est invariant de forme si son partenaire $v_1(x, a_0)$ s'écrit sous la forme

$$v_1(x, a_0) = v_0(x, a_1) + R(a_0) \quad (1.75)$$

où $R(a_0)$ est une fonction indépendante de x , appelée reste, et a_1 est un nouveau ensemble de paramètres, reliés aux anciens par une certaine fonction

$$a_1 = f(a_0). \quad (1.76)$$

Ainsi, de l'utilisation de la condition (1.75) et de la hiérarchie d'Hamiltoniens, discutée dans la section précédente, on peut facilement obtenir les valeurs propres et les fonctions propres quand la supersymétrie est non brisée. En effet, on a vu que l'état fondamental de H_0 est caractérisé par

$$\begin{cases} E_0^0(a_0) = 0 \\ \Psi_0^{(0)}(x, a_0) = N \exp \left[- \int^x W_0(y, a_0) dy \right]. \end{cases} \quad (1.77)$$

Si on ajoute aux deux membres de (1.75) la partie cinétique, on peut écrire

$$\begin{aligned} H_1(x, a_0) &= H_0(x, a_1) + R(a_0) \\ &= A_0^+(x, a_1) A_0(x, a_1) + R(a_0). \end{aligned} \quad (1.78)$$

En comparant (1.45) et (1.78), on peut faire l'identification suivante

$$E_1^{(0)}(a_0) = R(a_0), \quad (1.79)$$

et

$$A_0(x, a_1) = A_1(x, a_0). \quad (1.80)$$

D'où $E_1^{(0)}(a_0)$ est simultanément l'énergie du premier état excité de H_0 et l'énergie de l'état fondamental de H_1 , c'est-à-dire

$$E_1^{(0)}(a_0) = E_0^{(1)}(a_0) = R(a_0). \quad (1.81)$$

Par ailleurs, à partir de (1.78), les Hamiltoniens $H_1(x, a_0)$ et $H_0(x, a_1)$ possèdent les mêmes fonctions propres. On peut donc écrire

$$\Psi_n^{(1)}(x, a_0) = \Psi_n^{(0)}(x, a_1). \quad (1.82)$$

A partir de (1.82), on obtient

$$\begin{aligned} H_2(x, a_0) &= H_0(x, a_2) + R(a_1) + R(a_0) \\ &= A_0^+(x, a_2) A_0(x, a_2) + R(a_1) + R(a_0), \end{aligned} \quad (1.83)$$

et en comparant (1.55) et (1.83), on aboutit à l'identification suivante :

$$E_2^{(0)}(a_0) = E_1^{(1)}(a_0) = R(a_1) + R(a_0), \quad (1.84)$$

où $E_2^{(0)}(a_0)$ est l'énergie de premier état excité de H_1 et aussi l'énergie de l'état fondamental de H_2 .

Ainsi, on a

$$A_0(x, a_2) = A_2(x, a_0), \quad (1.85)$$

et à partir de (1.83), l'Hamiltonien $H_2(x, a_0)$ et $H_0(x, a_2)$ possèdent les mêmes fonctions propres. Nous pouvons donc écrire

$$\Psi_n^{(2)}(x, a_0) = \Psi_n^{(0)}(x, a_2), \quad (1.86)$$

avec

$$a_2 = f(a_1) = f(f(a_0)). \quad (1.87)$$

Il est maintenant aisé de se rendre compte que de façon générale, on peut écrire

$$\begin{aligned} H_m(x, a_0) &= H_0(x, a_m) + R(a_{m-1}) + \cdots + R(a_1) + R(a_0) \\ &= A_0^+(x, a_m) A_0(x, a_m) + \sum_{k=1}^m R(a_{k-1}), \end{aligned} \quad (1.88)$$

avec

$$a_m = f^m(a_0), m \geq 1, \quad (1.89)$$

et f^m signifie que la fonction f est appliquée m fois.

On peut définir aussi une nouvelle forme de $H_m(x, a_0)$ comme

$$H_m(x, a_0) = -\frac{d^2}{dx^2} + v_0(x, a_m) + \sum_{k=1}^m R(a_{k-1}). \quad (1.90)$$

En comparant (1.65) et (1.88), on obtient

$$E_m^{(0)}(a_0) = \sum_{k=1}^m R(a_{k-1}); \quad E_0^{(0)}(a_0) = 0, \quad (1.91)$$

et

$$A_m(x, a_0) = A_0(x, a_m). \quad (1.92)$$

En utilisant (1.88), il vient que

$$\Psi_n^{(m)}(x, a_0) = \Psi_n^{(0)}(x, a_m). \quad (1.93)$$

En reportant (1.92) et (1.93) dans (1.72) et (1.73), on obtient

$$\Psi_{n+m}^{(0)}(x, a_0) = \Gamma \Psi_n^{(0)}(x, a_m), \quad (1.94)$$

avec

$$\Gamma = \frac{A_0^+(a_0) A_0^+(a_1) \cdots A_0^+(a_{m-1})}{\sqrt{\left(E_n^{(m)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)\right) \left(E_n^{(m)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0)\right) \cdots \left(E_n^{(m)}(a_0) - E_0^{(m-1)}(a_0)\right)}} \quad (1.95)$$

Si on pose $n = 0$, on obtient

$$\Psi_m^{(0)}(x, a_0) = \mu \Psi_0^{(0)}(x, a_m), \quad (1.96)$$

où

$$\mu = \frac{A_0^+(a_0) A_0^+(a_1) \cdots A_0^+(a_{m-1})}{\sqrt{\left(E_0^{(m)}(a_0) - E_0^{(0)}(a_0)\right) \left(E_0^{(m)}(a_0) - E_0^{(1)}(a_0)\right) \cdots \left(E_0^{(m)}(a_0) - E_0^{(m-1)}(a_0)\right)}} \quad (1.97)$$

Enfin, si l'on connaît la fonction propre de l'état fondamental $\Psi_0^{(0)}(x, a_m)$ de H_0 , on peut déterminer toutes les fonctions propres $\Psi_m^{(0)}(x, a_0)$ en appliquant l'opérateur A_0^+ . Alors dans un cadre plus général, la relation (1.91) permet de générer la valeur de l'énergie de n'importe quel niveau de H_0 à partir de la fonction de son énergie fondamentale $E_0^{(0)}$ et du reste $R(a_0)$. Parallèlement, la relation (1.93) permet de générer la fonction propre de n'importe quel niveau de Hamiltonien à partir de la fonction propre du niveau fondamental.

1.5.1 Forme de la fonction f

D'après l'étude présentée plus haut, la fonction f qui caractérise l'invariance de forme d'un potentiel supersymétrique pourrait être arbitraire. Cependant, jusqu'à présent on a trouvé seulement trois formes différentes pour cette fonction. Au début de la découverte de l'invariance de forme, on a constaté que pour tous les potentiels connus en mécanique quantique qui sont supersymétriques et invariants de forme, la fonction f génère une translation entre les anciens et les nouveaux paramètres,

$$a_1 = f(a_0) = a_0 + \alpha,$$

où α est un paramètre fixe. On a alors cru que seule l'invariance par translation est admise dans la supersymétrie en mécanique quantique.

En 1993 : Khare et U. Sukhatme [16] montrèrent qu'il peut exister d'autres types de fonc-

tions de la forme

$$a_1 = qa_0, \text{ avec } 0 < q < 1, \quad (1.98)$$

ou encore

$$a_1 = \frac{qa_0}{1 + pa_0} \text{ avec } 0 < q < 1 \text{ et } pa_0 \ll 1.$$

Chapitre 2

Symétrie CPT et nouvelle théorie quantique

2.1 Introduction :

Il est connu en algèbre que si un opérateur est Hermitien, ses valeurs propres sont toutes réelles et les fonctions propres correspondantes forment une base orthogonale. En revanche, s'il est non Hermitien alors ses valeurs propres ne sont pas garanties d'être réelles. Ses valeurs propres sont en général complexes. En mécanique quantique, l'Hamiltonien d'un système physique, qui est responsable de sa dynamique, est considéré comme un opérateur défini sur un espace de Hilbert et de plus Hermitien par rapport à cet espace.

Ainsi, un Hamiltonien Hermitien conduit automatiquement à une évolution unitaire de la fonction d'onde du système associé, ce qui est compatible avec son interprétation probabiliste. Pour ces raisons, l'herméticité de l'Hamiltonien et de toutes les observables physiques, était toujours vue comme une condition nécessaire en mécanique quantique pour l'obtention de résultats physiques. Depuis quelques temps, on voudraient remettre en question cette hypothèse fondamentale de la mécanique quantique en tentant de construire une nouvelle théorie quantique pour des Hamiltoniens qui ne sont pas nécessairement Hermitiens

Le but de ce chapitre est de donner un aperçu sur le développement de cette nouvelle théorie et de faire ressortir les principaux résultats auxquels on est arrivé dans les recherches, et qui seront utilisés dans les chapitres suivants.

2.2 Propriétés des Hamiltoniens PT symétriques

2.2.1 Réalité des valeurs propres d'un Hamiltonien PT symétrique

Si on veut construire une théorie quantique avec des Hamiltoniens qui ne sont pas Hermitiens mais PT symétriques, il est fondamental de connaître les conditions suffisantes pour que les spectres de tels Hamiltoniens soient réels et pour que l'évolution dans le temps des fonctions d'onde associées soit unitaire. La réponse à cette question a été donnée par Bender et co-auteurs dans une série d'articles depuis 1988 [5, 6, 7, 8, 9]. Ils avaient construit une famille d'Hamiltoniens à une dimension, non Hermitiens, dont le potentiel est une fonction complexe, qui répondaient à l'exigence de la réalité des valeurs propres [17]. L'Hamiltonien de référence (à une dimension) est donné par

$$H = p^2 + x^2 (ix)^\nu \quad \text{avec} \quad \nu \in R. \quad (2.1)$$

L'analyse de cette famille d'Hamiltoniens vis-à-vis des opérations d'inversion de l'espace ou parité P et du renversement du temps T montre qu'ils partagent tous la propriété d'être invariants par l'opération composée PT , (voir appendice A). Autrement dit, H commute avec l'opérateur produit PT ,

$$[H, PT] = 0. \quad (2.2)$$

Par ailleurs, avec l'hypothèse de certaines conditions aux limites [5], il a été prouvé, par des calculs numériques de haute précision, que les spectres des Hamiltoniens (2.1) sont réels et positifs pour $\nu \geq 0$ et pour $\nu < 0$ ils sont complexes.

Maintenant, il est bien connu que la réalité des valeurs propres d'un Hamiltonien PT symétrique est une conséquence de la non brisure de la symétrie PT , qui signifie que les fonctions propres de H sont simultanément fonctions propres de PT . En fait, même si H et PT commutent, d'après la relation (2.2), on ne peut pas affirmer qu'ils possèdent les mêmes fonctions propres, comme c'est le cas en mécanique quantique. La raison est que PT n'est pas un opérateur linéaire mais anti-linéaire (voir appendice A), ce qui ne garantit pas l'existence d'un ensemble de fonctions propres communes.

Ainsi, pour construire une théorie quantique à partir d'Hamiltoniens PT symétriques, on

exige de plus que la symétrie ne soit pas brisée. Il faut noter cependant que cette condition n'est pas évidente car il n'existe aucun moyen pour affirmer à priori que pour tel Hamiltonien PT symétrique, la symétrie est brisée ou non. Il faut tout d'abord déterminer ses fonctions propres pour en tirer une conclusion.

Avec cette condition supplémentaire, on peut démontrer la réalité des valeurs propres d'un Hamiltonien PT symétrique. En effet, soit donc $\{\Phi_n(x)\}$, pour $n = 1, 2, \dots$, l'ensemble des fonctions propres communes à H et PT , on a

$$H\Phi_n(x) = E_n\Phi_n(x), \quad (2.3)$$

$$PT\Phi_n(x) = \lambda_n\Phi_n(x), \quad (2.4)$$

avec E_n et λ_n les valeurs propres correspondantes, qui sont à priori complexes. Cependant, puisque $(PT)^2 = 1$, il résulte que $|\lambda_n|^2 = 1$ pour toutes les valeurs de n possibles. Ainsi λ_n est une phase qui peut être absorbée dans la fonction propre $\Phi_n(x)$ de sorte que, sans perte de généralité, on peut prendre $\lambda_n = 1$ et écrire

$$PT\Phi_n(x) = \Phi_n(x). \quad (2.5)$$

Par ailleurs, en appliquant PT à gauche sur les deux membres de (2.3) et tenant compte de (2.2) et (2.5), on obtient

$$H\Phi_n(x) = E_n^*\Phi_n(x). \quad (2.6)$$

Cette dernière relation, combinée avec (2.3), entraîne que les valeurs propres sont réelles.

$$E_n = E_n^*.$$

2.2.2 Fonctions propres et espace de Hilbert

La question qui se pose maintenant est de savoir si les Hamiltoniens possédant une PT symétrie non brisée peuvent décrire la dynamique de systèmes physiques réels. Autrement dit, il faut savoir si les fonctions propres de tels Hamiltoniens peuvent engendrer des espaces de Hilbert munis de produits scalaires conduisant à des normes positives. En plus, il faut aussi

garantir que l'évolution des états propres dans le temps demeure unitaire.

Bien entendu, ces deux exigences sont satisfaites dans la théorie quantique usuelle, avec des Hamiltoniens Hermitiens. La première permet d'interpréter la norme d'un état comme une probabilité, qui doit être définie positive, alors que la deuxième condition garantie justement l'indépendance de cette probabilité par rapport au temps.

Les fonctions propres engendrent donc un espace vectoriel de Hilbert. Le produit scalaire de deux fonctions quelconques $\psi(x)$ et $\varphi(x)$, dans le nouveau espace de Hilbert, a été définie comme

$$\begin{aligned} (\psi, \varphi)_{PT} &= \int_c dx [PT\psi(x)\varphi(x)] \\ &= \int_c dx \psi^*(-x)\varphi(x), \end{aligned} \quad (2.7)$$

où c est un certain contour dans le plan complexe.

L'avantage de cette définition du produit scalaire est que, comme en mécanique quantique ordinaire, la norme de toute fonction est indépendante de sa phase globale et est conservée dans le temps. Cependant, cette définition contient un inconvénient majeur qui réside dans le fait que les normes de certains états propres d'Hamiltoniens PT symétriques sont négatives. Par exemple, pour $\nu \geq 0$ dans (2.1) il a été prouvé numériquement, avec une très grande précision [6, 7, 15], que les fonctions propres vérifient les relations suivantes

$$(\Phi_n, \Phi_m)_{PT} = (-1)^n \delta_{nm}, \quad (2.8)$$

et

$$\sum_n (-1)^n \Phi_n(x)\Phi_n(y) = \delta(x-y). \quad (2.9)$$

Evidemment, ces deux relations présentent des anomalies par rapport à ce qui est admis en mécanique quantique usuelle. En effet, il découle que les normes de certains états sont négatives et par conséquent ces derniers ne peuvent pas être interprétés comme des probabilités. Par ailleurs, l'espace engendré par les fonctions propres, qui n'est guère un espace de Hilbert usuel, ne peut pas être considéré comme un espace complet. Dans la représentation de Dirac, on peut

écrire les relations (2.8) et (2.9) comme

$$\langle \Phi_n | \Phi_m \rangle = (-1)^n \delta_{nm}, \quad (2.10)$$

et

$$\sum_n (-1)^n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = I. \quad (2.11)$$

où $|\Phi_n\rangle$ et le ket de Dirac associé à la fonction propre $\Phi_n(x)$ et $\langle \Phi_n|$ le bra correspondant par rapport au produit scalaire (2.7). Dans la suite, nous appellerons ces dernières relations, pseudo relation d'orthonormalisation et pseudo relation de fermeture.

2.3 Nouvelle symétrie pour les Hamiltoniens PT symétriques

L'inconsistance des relations (2.8) et (2.9) a même poussé certains auteurs à renoncer, pendant un certain temps, à l'idée de construire une théorie quantique pour ce type d'Hamiltoniens non Hermitiens [18, 20]. Cependant, plus tard il a été montré que tous les Hamiltoniens PT symétriques dont la symétrie n'est pas brisée possèdent une autre symétrie cachée, engendrée par un nouveau opérateur dénoté C [9]. Autrement dit, si un Hamiltonien H est PT symétrique et si cette symétrie n'est pas brisée il existe un opérateur non trivial C , appelé opérateur de conjugaison de charge, qui commute avec H et PT . Ainsi,

$$[H, C] = 0, \quad [C, PT] = 0, \quad (2.12)$$

et par conséquent

$$[H, CPT] = 0.$$

On montre alors que les fonctions propres communes à H et CPT sont toutes de normes définies positives [9]. Ainsi, une fois que l'opérateur C est déterminé, il sera possible donc de construire une nouvelle théorie quantique qui satisfait à toutes les contraintes requises. Cependant, jusqu'à présent il n'existe pas de méthodes systématiques pour déterminer l'opérateur C .

2.3.1 Construction de l'opérateur C

Bien que l'existence de l'opérateur C peut être prouvée facilement [9], sa détermination explicite n'est pas une chose facile dans un cadre général. En effet, jusqu'à présent il n'existe que des tentatives pour déterminer C au premier ordre par rapport à un paramètre de perturbation [21, 9]. Ici, nous allons suivre brièvement la recette originale de Bender pour prouver l'existence de l'opérateur C . Les détails peuvent être suivis dans la référence [9].

Le but est alors de chercher un opérateur C , représentant une nouvelle symétrie cachée, qui doit commuter simultanément avec H et PT et telles que les nouvelles fonctions propres communes à H et CPT ne présentent pas les anomalies citées plus haut.

Si les $|\Phi_n\rangle$ sont les kets associés aux fonctions propres $\Phi_n(x)$, l'opérateur C doit donc transformer $|\Phi_n\rangle$ en un nouveau ket $\|\Phi_n\rangle$ dont la norme PT est positive. Ce nouveau vecteur doit satisfaire à

$$\begin{aligned}\|\Phi_n\rangle &= C |\Phi_n\rangle \\ &= (-1)^n |\Phi_n\rangle.\end{aligned}\tag{2.13}$$

De cette manière, la pseudo relation d'orthonormalisation et la pseudo relation de fermeture vont conduire à aux relations d'orthonormalisation et de fermeture usuelles (voir des exemples concrets dans le chapitre 5).

En utilisant la pseudo relation de fermeture (2.11), on peut représenter C comme

$$C = \sum_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|,\tag{2.14}$$

qui s'écrit dans la représentation position comme

$$C(x, y) = \sum_n \Phi_n(x) \Phi_n(y).\tag{2.15}$$

Ainsi, cet opérateur est bien défini en fonction des états propres PT symétriques de l'Hamiltonien. Autrement dit, C est une fonction de H . En effet, en utilisant la pseudo relation de

fermeture (2.11), on peut représenter H comme

$$H = \sum_n (-1)^n E_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|. \quad (2.16)$$

Evidemment,

$$[H, C] = 0. \quad (2.17)$$

Par ailleurs, on vérifie facilement que

$$C^2 = 1. \quad (2.18)$$

Pour terminer, signalons que puisque C est une fonction de H , il est un opérateur spécifique qui dépend particulièrement du système étudié, contrairement aux opérateurs P et T . Cette contrainte conduit à conclure que même si l'opérateur C résout l'anomalie de la non positivité de la norme, la théorie quantique qu'il peut engendrer ne peut être globale mais spécifique pour chaque Hamiltonien PT symétrique. A notre avis, ceci est dû au fait que la relation (2.13) ne peut en fait être considérée comme une définition complète d'un opérateur qui représente une réelle symétrie.

Chapitre 3

Etude par la supersymétrie d'une famille de potentiels centraux, singuliers et Hermitiens

3.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons étudier les états liés d'une classe de potentiels centraux singuliers par l'approche de la supersymétrie.

Considérons la famille des potentiels $v^{(p)}(r)$, donnée par

$$v^{(p)}(r; X) = cr^{-2p} + br^{-p-1} + dr^{-2} + gr^{-p+1} + ar^2 + er^{p+1} + fr^{2p} + kr^{p-1}, \quad (3.1)$$

où X caractérise l'ensemble des paramètres réels a, b, c, d, e, g, f , et k et $p \in [0, 1[\cup]1, \infty[$. Cette famille de potentiels peut être vue comme une double généralisation des potentiels étudiés dans la référence [22]. Pour $p = 3$, on retrouve le "sextic potentiel"

$$v^{(3)}(r; X) = cr^{-6} + br^{-4} + (d + g)r^{-2} + (a + k)r^2 + er^4 + fr^6, \quad (3.2)$$

qui a été largement étudié dans la littérature [23, 24, 25, 26, 22] par différentes approches dont l'approche supersymétrique qu'on trouve dans le chapitre 3 de la référence [22]. Si on pose

$e = f = k = 0$, on retrouve la famille de potentiels

$$v^{(p)}(r; X) = cr^{-2p} + br^{-p-1} + dr^{-2} + gr^{-p+1} + ar^2, \quad (3.3)$$

étudiée dans le chapitre 4 de la référence [22].

Dans le cas où $p = 1$, le potentiel $v^{(1)}(r)$ se réduit à

$$v^{(1)}(r; X) = (c + b + d)r^{-2} + (a + e + f)r^2 + g + k, \quad (3.4)$$

qui n'est autre que le potentiel d'un oscillateur harmonique isotrope dans une barrière de potentiel centrifuge, dont la solution exacte est bien connue.

Ainsi, l'intérêt de ces potentiels pour $p \neq 1$ est qu'ils peuvent être considérés comme des potentiels harmoniques perturbés.

Il est clair que la résolution de l'équation de Schrödinger exactement pour une telle famille est très difficile, voire même impossible dans le cas général. Notre but est de déterminer les liens qu'il faut imposer aux paramètres du potentiel pour qu'on puisse déterminer les caractéristiques de l'état fondamental et éventuellement celles du premier état excité en fonction de p .

Nous avons vu dans le chapitre 1 que la résolution de l'équation de Schrödinger pour les états liés par l'approche de la méthode supersymétrique passe tout d'abord par la résolution de l'équation de Riccati et la détermination d'un superpotentiel, qui servira pour obtenir l'énergie et la fonction de l'état fondamental. Le problème est que, pour le potentiel (3.1) un superpotentiel existe seulement si les paramètres du potentiel satisfont à certaines contraintes entre eux. Par conséquent, les solutions obtenues seront conditionnées par ces contraintes et seront appelées "solutions conditionnelles".

Avant d'entamer les calculs, remarquons que l'équation de Schrödinger à trois dimensions pour le potentiel central $v(r)$ se ramène à une équation à une dimension pour le potentiel effectif $V(r)$, donné par

$$V(r) = v(r) + \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (3.5)$$

où $l \in \mathbb{N}$, est la valeur propre du moment cinétique orbital.

Ainsi, nous allons donc étudier l'équation de Schrödinger sur l'intervalle $r \geq 0$ pour le potentiel effectif défini par

$$V^{(p)}(r; X) = cr^{-2p} + br^{-p-1} + hr^{-2} + gr^{-p+1} + ar^2 + er^{p+1} + fr^{2p} + kr^{p-1}, \quad (3.6)$$

où, dans X , on remplace le paramètre d par h , donné par

$$h = d + l(l + 1). \quad (3.7)$$

3.2 Conditions pour l'existence d'états liés

Il est bien connu que l'existence d'états liés pour l'équation de Schrödinger est subordonnée par l'existence de poches (minima) dans l'allure du potentiel correspondant. Vu que les potentiels considérés ne sont pas simples, nous allons simplement fixer les signes des paramètres $(a, b, c, h, e, g, f, k, p)$ pour créer des conditions suffisantes pour l'existence d'états liés.

Pour ne pas trop compliquer les choses, nous admettrons que $V^{(p)}(r; X)$ est une fonction continue, ne possédant pas de puits infinis où la particule pourrait être absorbée. D'autre part nous considérons seulement les potentiels pour lesquels le mouvement de la particule est complètement confiné. Ainsi nous admettrons que $V^{(p)}(r; X)$ est tels que

$$V^{(p)}(r) \rightarrow \infty \text{ pour } r = 0 \text{ et } r \rightarrow \infty. \quad (3.8)$$

Il s'avère que la réalisation de ces conditions dépend à la fois de la valeur du paramètre p et des signes des autres paramètres. Par ailleurs, puisqu'on voudrait retrouver certains résultats connus dans la littérature comme cas limites, notamment pour $f = 0$, on admettra que les paramètres a, d, c et f satisfont [22]

$$a > 0; d \geq 0; c > 0 \text{ et } f \geq 0, \quad (3.9)$$

et les autres paramètres peuvent être arbitraires.

3.3 Propriétés de l'état fondamental conditionnel

Comme on va le voir, les potentiels partenaires diffèrent seulement par les paramètres b, k et d . Pour résoudre l'équation de Schrödinger associée à $V^{(p)}(r; X)$ par la méthode super symétrique, on réécrit les paramètres b, k et d respectivement b_1, k_1 et d_1 , et $V^{(p)}(r; X)$ par $V_1^{(p)}(r, X_1)$, donné par

$$V_1^{(p)}(r; X_1) = cr^{-2p} + b_1 r^{-p-1} + h_1 r^{-2} + gr^{-p+1} + ar^2 + er^{p+1} + fr^{2p} + k_1 r^{p-1}. \quad (3.10)$$

Le superpotentiel sera choisi sous la forme

$$W_1(r, X_1) = \frac{\alpha_1}{r} + \beta r + \frac{\gamma}{r^p} + \eta r^p, \quad (3.11)$$

où les paramètres α_1, β, γ , et η sont à déterminer en fonction de $a, b_1, c, h_1, e, g, f, k_1$ et p . Tout d'abord écrivons la fonction d'onde de l'état fondamental sous la forme

$$\begin{aligned} \Psi_{p,0}^{(1)}(r, X_1) &= N_0 \exp\left(-\int^r W_1(r', X_1) dr'\right) \\ &= N_0 \exp\left(-\alpha_1 \ln r - \frac{\beta r^2}{2} + \frac{\gamma}{p-1} r^{-p+1} - \frac{\eta}{p+1} r^{p+1}\right), \end{aligned} \quad (3.12)$$

où N_0 est une constante de normalisation.

Nous devons nous assurer que la symétrie n'est pas brisée en exigeant que cette fonction soit de carré sommable. Ceci entraînera certaines contraintes sur les paramètres α_1, β, γ et η . Pour ce faire, il suffit qu'elle soit régulière aux points $r = 0$ et $r \rightarrow \infty$. Par ailleurs, il est clair que le comportement au voisinage de $r = 0$ et $r \rightarrow \infty$ dépend de la valeur de p . Ainsi on peut s'assurer aisément que l'on doit toujours être dans l'une des situations suivantes :

$$p < 1 \Rightarrow \begin{cases} \beta > 0 \text{ et } \alpha_1 < 0 & \text{I} \\ \beta \geq 0, \eta > 0 \text{ et } \alpha_1 < 0 & \text{II} \\ \beta \geq 0, \eta \geq 0, \gamma > 0 \text{ et } \alpha_1 < 0 & \text{III} \end{cases}, \quad (3.13)$$

$$p > 1 \Rightarrow \begin{cases} \eta > 0 \text{ et } \gamma < 0 & \text{I} \\ \eta > 0, \gamma \leq 0 \text{ et } \alpha < 0 & \text{II} \\ \eta \geq 0, \beta > 0 \text{ et } \gamma < 0 & \text{III} \\ \eta \geq 0, \beta > 0, \gamma \leq 0 \text{ et } \alpha < 0 & \text{IV} \\ \eta \geq 0, \beta \geq 0, \alpha > 0 \text{ et } \gamma < 0 & \text{V} \end{cases} \quad (3.14)$$

Pour construire les partenaires, il faut calculer la dérivée première et le carré du superpotentiel, qui sont donnés par

$$W_1'(r, X_1) = -\frac{\alpha_1}{r^2} + \beta - \gamma p r^{-p-1} + \eta p r^{p-1} \quad (3.15)$$

et

$$W_1^2(r, X_1) = \frac{\alpha_1^2}{r^2} + \beta^2 r^2 + 2\alpha_1 \beta + \frac{\gamma^2}{r^{2p}} + \eta^2 r^{2p} + 2\gamma\eta + \frac{2\alpha_1 \gamma}{r^{p+1}} + 2\alpha_1 \eta r^{p-1} + 2\beta \gamma r^{-p+1} + 2\beta \eta r^{p+1}. \quad (3.16)$$

On pose

$$V_1^{(p)}(r, X_1) = W_1^2(r, X_1) - W_1'(r, X_1) + E_0^{(1)}(p, X_1), \quad (3.17)$$

où $E_0^{(1)}(p, X_1)$ est l'énergie de l'état fondamental de $V_1^{(p)}(r, x_1)$.

En reportant (3.15) et (3.16) dans (3.17), on obtient

$$V_1^{(p)}(r; X_1) = (\alpha_1 + \alpha_1^2)r^{-2} + \beta^2 r^2 + (2\alpha_1 \gamma + \gamma p)r^{-p-1} + \frac{\gamma^2}{r^{2p}} + \eta^2 r^{2p} + (2\alpha_1 \eta - \eta p)r^{p-1} + 2\beta \gamma r^{-p+1} + 2\beta \eta r - \beta + 2\gamma \eta + 2\alpha_1 \beta + E_{p,0}^{(1)}(x_1). \quad (3.18)$$

En identifiant les termes de mêmes puissances entre (3.10) et (3.18), on obtient le système d'équations couplées non linéaires suivant :

$$\beta^2 = a, \quad (3.19)$$

$$\gamma^2 = c, \quad (3.20)$$

$$\eta^2 = f, \quad (3.21)$$

$$\alpha_1 + \alpha_1^2 = h_1, \quad (3.22)$$

$$\beta - 2\gamma\eta - 2\alpha_1\beta = E_{p,0}^{(1)}(X_1), \quad (3.23)$$

$$(2\alpha_1 + p)\gamma = b_1, \quad (3.24)$$

$$(2\alpha_1 - p)\eta = k_1, \quad (3.25)$$

$$2\beta\gamma = g, \quad (3.26)$$

$$2\beta\eta = e. \quad (3.27)$$

On obtient donc neuf équations et cinq inconnus qui sont α_1 , β , γ , η et l'énergie de l'état fondamental $E_{p,0}^{(1)}(X_1)$. Pour résoudre ce système, nous allons choisir les cinq premières équations (3.19)-(3.23) et les équations restantes (3.24)-(3.27) serviront comme des contraintes entre les paramètres du potentiel. Par ailleurs, la résolution du système (3.19)-(3.23) dépend des conditions imposées aux paramètres du potentiel dans (3.9) et des contraintes (3.13) et (3.14).

3.3.1 Propriétés de l'état fondamental pour $p < 1$.

Il est aisé de voir que la solution du système (3.19)-(3.23) qui est compatible avec (3.9) nous met dans la situation I de (3.13), qui exige que $\beta > 0$, $\alpha_1 < 0$ mais γ et η arbitraires. Ainsi, les solutions sont alors données par

$$\alpha_1 = -\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 + 4h_1} \right), \quad (3.28)$$

$$\beta = \sqrt{a}, \quad (3.29)$$

$$\gamma = \sigma\sqrt{c}, \quad (3.30)$$

et

$$\eta = \sigma' \sqrt{f}, \quad (3.31)$$

avec $\sigma, \sigma' = \pm 1$.

En tenant compte des ces solutions, les équations (3.24)-(3.27) conduisent aux relations suivantes entre les paramètres du potentiel

$$g = 2\sigma\sqrt{ac}, \quad (3.32)$$

$$e = 2\sigma'\sqrt{fa}, \quad (3.33)$$

$$b_1 = \sigma\sqrt{c}(p-1-\sqrt{4h_1+1}), \quad (3.34)$$

et

$$k_1 = -\sigma'\sqrt{f}(p+1+\sqrt{4h_1+1}). \quad (3.35)$$

Le potentiel $V_1^{(p)}(r, X_1)$, pour $p < 1$, s'écrit donc comme

$$\begin{aligned} V_1^{(p<1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') &= cr^{-2p} + \sigma\sqrt{c}(p-1-\sqrt{4h_1+1})r^{-p-1} + h_1r^{-2} + 2\sigma\sqrt{ac}r^{-p+1} \\ &+ ar^2 + 2\sigma'\sqrt{af}r^{p+1} - \sigma'\sqrt{f}(p+1+\sqrt{4h_1+1})r^{p-1} + fr^{2p} \end{aligned} \quad (3.36)$$

En reportant dans (3.12) et (3.23), on obtient la fonction propre de l'état fondamental et l'énergie correspondante sous les formes

$$\Psi_{p<1,0}^{(1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') \propto r^{\frac{1}{2}(1+\sqrt{1+4h_1})} \exp\left(-\frac{\sqrt{a}r^2}{2} + \frac{\sigma\sqrt{c}}{p-1}r^{-p+1} - \frac{\sigma'\sqrt{f}}{p+1}r^{p+1}\right), \quad (3.37)$$

et

$$E_{p<1,0}^{(1)}(X_1, \sigma, \sigma') = \sqrt{a}\left(2 + \sqrt{4h_1+1}\right) - 2\sigma\sigma'\sqrt{cf}. \quad (3.38)$$

On remarque au passage qu'en fait l'énergie de l'état fondamental ne dépend pas explicitement du paramètre p mais la fonction d'onde en dépend. Ce résultat est quelque part surprenant.

3.3.2 Exemple illustratif

Considérons le cas particulier correspondant à $a = c = f = 2$, $d_1 = 1$, $l = 0$, et $p = 1/2$. Dans ce cas le potentiel s'écrit

$$V_1^{(\frac{1}{2})}(r, X_1, \sigma, \sigma') = 2r^{-1} + \sigma\sqrt{2}(-1/2 - \sqrt{5})r^{-3/2} + r^{-2} + 4\sigma r^{1/2} + 2r^2 + 4\sigma' r^{\frac{3}{2}} + 2r - \sigma' \sqrt{2}(3/2 + \sqrt{5})r^{-1/2}. \quad (3.39)$$

L'énergie de l'état fondamental est donnée par

$$E_{\frac{1}{2},0}^{(1)}(x_1, \sigma, \sigma') = \sqrt{2} \left(2 + \sqrt{5} \right) - 4\sigma\sigma', \quad (3.40)$$

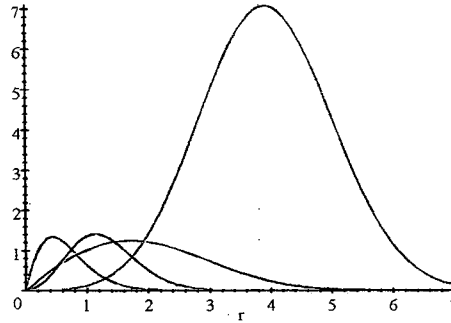
est la fonction propre correspondante, normalisée à 1, s'écrit

$$\Psi_{\frac{1}{2},0}^{(1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') = N_{\sigma,\sigma'} r^{\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})} \exp\left(-\frac{\sqrt{2}r^2}{2} - 2\sqrt{2}\sigma r^{\frac{1}{2}} - \frac{2\sqrt{2}\sigma'}{3} r^{\frac{3}{2}}\right), \quad (3.41)$$

avec

$$N_{1,1} \simeq \frac{1}{0.021}, \quad N_{1,-1} \simeq \frac{1}{0.090}, \quad N_{-1,1} \simeq \frac{1}{3.007}, \quad N_{-1,-1} \simeq \frac{1}{241.584} \quad (3.42)$$

Les allures de $\Psi_{\frac{1}{2},0}^{(1)}(r, X_1, \sigma, \sigma')$ pour les différentes valeurs de (σ, σ') sont représentées sur les figures suivantes :



Rouge : $\sigma = \sigma = 1$; Noire : $\sigma = -\sigma = 1$; Bleue : $\sigma = -\sigma = -1$; Verte : $\sigma = \sigma = -1$
Il est clair que cette fonction ne présente aucun noeud, c'est-à-dire qu'elle ne s'annule pas pour $r > 0$ et par conséquent, elle représente bien la fonction d'onde d'un état fondamental.

3.3.3 Propriétés de l'état fondamental pour $p > 1$.

Dans ce cas, il est aisé de se rendre compte que la résolution du système d'équations (3.19)-(3.23) qui est compatible avec les contraintes (3.9) nous met dans la situation III de (3.14), avec $\eta \geq 0$, $\beta > 0$, $\gamma < 0$ et α arbitraire. Ainsi, les solutions peuvent être données par

$$\beta = \sqrt{a}, \quad (3.43)$$

$$\gamma = -\sqrt{c}, \quad (3.44)$$

$$\eta = \sqrt{f}. \quad (3.45)$$

et

$$\alpha_1 = -\frac{1}{2} \left(1 + \sigma \sqrt{1 + 4h_1} \right). \quad (3.46)$$

Les équations (3.24)-(3.27) conduisent aux contraintes sur les paramètres du potentiel. En tenant compte de (3.43), (3.44), (3.45) et (3.46), ces contraintes sont données par

$$b_1 = \sqrt{c} \left(\sigma \sqrt{4h_1 + 1} + 1 - p \right) \quad (3.47)$$

$$k_1 = -\sqrt{f} \left(\sigma \sqrt{4h_1 + 1} + 1 + p \right) \quad (3.48)$$

$$g = -2\sqrt{ac}, \quad (3.49)$$

et

$$e = 2\sqrt{af}. \quad (3.50)$$

Ainsi, le potentiel $V_1^{(p)}(r, X_1)$, pour $p > 1$, peut avoir deux formes possibles selon le signe de $\sigma = \pm 1$. Il s'écrit

$$\begin{aligned} V_1^{(p>1)}(r, X_1, \sigma) = & cr^{-2p} + \sqrt{c} \left(\sigma \sqrt{4h_1 + 1} + 1 - p \right) r^{-p-1} + h_1 r^{-2} - 2\sqrt{ac} r^{-p+1} \\ & + ar^2 + 2\sqrt{af} r^{p+1} - \sqrt{f} \left(\sigma \sqrt{4h_1 + 1} + 1 + p \right) r^{p-1} + fr^{2p}, \end{aligned} \quad (3.51)$$

A partir des équations (3.23), (3.12), (3.43), (3.44), (3.45), (3.46), (3.47) et (3.48), on obtient l'énergie de l'état fondamental et la fonction propre correspondante pour l'onde partielle l en

fonction des paramètres du potentiel sous la forme

$$E_{p>1,0}^{(1)}(X_1, \sigma) = \sqrt{a} \left(2 + \sigma \sqrt{4h_1 + 1} \right) + 2\sqrt{fc}, \quad (3.52)$$

et

$$\Psi_{p>1,0}^{(1)}(r, x_1, \sigma) \propto r^{\frac{1}{2}(1+\sigma\sqrt{1+4h_1})} \exp \left(-\frac{\sqrt{a}r^2}{2} - \frac{\sqrt{c}}{p-1} r^{-p+1} - \frac{\sqrt{f}}{p+1} r^{p+1} \right). \quad (3.53)$$

On remarque aussi que l'énergie de l'état fondamental ne dépend pas aussi du paramètre p . Par ailleurs, on constate que si on choisit $\sigma = -1$ et $\sigma' = 1$ dans le cas $p < 1$, et $\sigma = 1$ dans le cas $p > 1$, les potentiels correspondants auront la même forme ainsi que les fonctions propres et les valeurs propres de leurs états fondamentaux.

3.3.4 Exemple illustratif

Considérons le cas correspondant à $a = c = f = 2$, $d = 1$, $l = 0$ et $p = 3$. Le potentiel s'écrit alors

$$V_1^{(3)}(r, X_1, \sigma) = 2r^{-6} + \sqrt{2} \left(\sigma\sqrt{5} + 2 \right) r^{-4} - 3r^{-2} + \left[2 - \sqrt{2} \left(\sigma\sqrt{5} + 4 \right) \right] r^2 + 4r^4 + 6r^6. \quad (3.54)$$

L'énergie propre et la fonction propre de l'état fondamental correspondant sont données par

$$E_{3,0}^{(1)}(X, \sigma) = \sqrt{2} \left(\sigma\sqrt{5} + 2 \right) + 4, \quad (3.55)$$

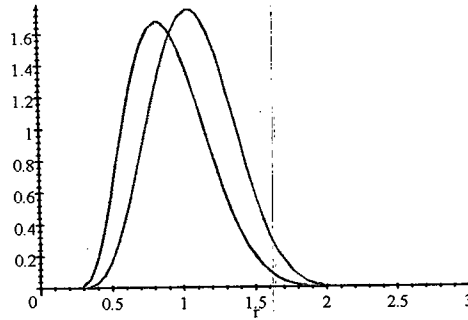
et

$$\Psi_{3,0}^{(1)}(r, X_1, \sigma) = N_\sigma r^{\frac{1}{2}(1+\sigma\sqrt{5})} \exp \left(-\frac{\sqrt{2}r^2}{2} - \frac{\sqrt{2}}{2} r^{-2} - \frac{\sqrt{2}}{4} r^4 \right), \quad (3.56)$$

avec

$$N_1 \simeq \frac{1}{0.122}, \quad N_{-1} \simeq \frac{1}{0.144}. \quad (3.57)$$

Les allures sont représentées sur les figures suivantes :



Rouge : $\sigma = 1$; Bleue : $\sigma = -1$

Dans ce cas aussi, on constate que la fonction propre ne présente aucun noeud et par conséquent elle correspond bien à la fonction d'onde d'un état fondamental.

3.4 Invariance de forme et propriétés du premier état excité

Dans cette section nous nous proposons d'étudier l'invariance de forme du potentiel $V_1^{(p)}(r, X_1)$. Il est évident que si elle existe elle devrait être conditionnée par de nouvelles relations entre les paramètres du potentiel. Ainsi, on a

$$\begin{aligned} V_2^{(p)}(r, X_1) &= W_1^2(r, X_1) + W_1'(r, X_1) + E_{p,0}^{(1)}(X_1) \\ &= R(X_1) + cr^{-2p} + b_2r^{-p-1} + h_2r^{-2} + gr^{-p+1} + ar^2 + er^{p+1} + fr^{2p} + k_2r \end{aligned} \quad (3.58)$$

avec

$$R(X_1) = 2\beta, \quad (3.59)$$

$$b_2 = b_1 - 2p\gamma, \quad (3.60)$$

$$k_2 = k_1 + 2\eta p, \quad (3.61)$$

et

$$h_2 = h_1 - 2\alpha_1. \quad (3.62)$$

En comparant (3.58) et (3.10), on constate bien, qu'à une constante additive près, $V_2^{(p)}(r, X_1)$ peut être obtenu à partir de $V_1^{(p)}(r, X_1)$ en remplaçant les paramètres b_1 , k_1 , et h_1 , respective-

ment, par b_2 , k_2 , et h_2 , c'est-à-dire

$$V_2^{(p)}(r, X_1) = V_1^{(p)}(r, X_2) + R(X_1). \quad (3.63)$$

Pour qu'il ait invariance de forme, il faut vérifier les contraintes (3.24), (3.25), (3.26) et (3.27).

Pour obtenir les caractéristique du premier état excité de $V_1^{(p)}(r, X_1)$, alors l'expression de l'énergie et la fonction d'onde correspondantes du premier état excité s'écrivent comme suit

$$E_{p,1}^{(1)}(X_1, \sigma, \sigma') = E_{p,0}^{(1)}(X_2, \sigma, \sigma') + R(X_1), \quad (3.64)$$

et

$$\Psi_{p,1}^{(1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') \propto \left[-\frac{d}{dr} + W_{p,1}(r, X_1) \right] \Psi_{p,0}^{(1)}(r, X_2, \sigma, \sigma'). \quad (3.65)$$

3.4.1 Propriétés du premier état excité pour $p < 1$.

Dans ce cas, on remplace les pyromètres β , γ , η , α_1 par leurs expressions (3.29), (3.30), (3.31), (3.28). On obtient donc

$$R(X_1) = 2\sqrt{a}, \quad (3.66)$$

$$b_2 = b_1 - 2p\sigma\sqrt{c}, \quad (3.67)$$

$$k_2 = k_1 + 2p\sigma'\sqrt{f}, \quad (3.68)$$

et

$$h_2 = h_1 + 1 + \sqrt{4h_1 + 1} \quad (3.69)$$

où bien

$$4h_2 + 1 = \left(\sqrt{4h_1 + 1} + 2 \right)^2, \quad (3.70)$$

Maintenant, on obtient à partir de (3.38), (3.70) et (3.64), l'énergie du premier état excité sous la forme

$$E_{p<1,1}^{(1)}(X_1, \sigma, \sigma') = \sqrt{a} \left(6 + \sqrt{4h_1 + 1} \right) - 2\sigma\sigma'\sqrt{cf}. \quad (3.71)$$

Par ailleurs, à partir de (3.37), (3.70) et (3.65), la fonction propre du premier état excité est donnée par

$$\Psi_{p<1,1}^{(1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') \propto \left[-\left(2 + \sqrt{4h_1 + 1}\right) r^{-1} + 2\sqrt{ar} + 2\sigma\sqrt{cr^{-p}} + 2\sigma' \sqrt{fr^p} \right] \\ \times r^{\frac{1}{2}(3+\sqrt{4h_1+1})} \exp\left(-\frac{\sqrt{a}}{2}r^2 + \frac{\sigma\sqrt{c}}{p-1}r^{-p+1} - \frac{\sigma'\sqrt{f}}{p+1}r^{p+1}\right) \quad (3.72)$$

Les nouvelles contraintes s'obtiennent à partir de (3.34) et (3.35), en remplaçant b_1 par b_2 , k_1 par k_2 et d_1 par d_2 . On obtient donc

$$b_2 = \sigma\sqrt{c}\left(p - 1 - \sqrt{4h_2 + 1}\right), \quad (3.73)$$

et

$$k_2 = -\sigma'\sqrt{f}\left(p + 1 + \sqrt{4h_2 + 1}\right), \quad (3.74)$$

qui s'écrivent, en tenant compte des relations (3.66), (3.67) et (3.68), comme

$$b_1 = \sigma\sqrt{c}\left(3p - 3 + \sqrt{4h_1 + 1}\right), \quad (3.75)$$

et

$$k_1 = -\sigma'\sqrt{f}\left(3p + 3 + \sqrt{4h_1 + 1}\right). \quad (3.76)$$

En analysant les contraintes (3.75)-(3.76) d'une part et (3.34)-(3.35) d'autre part, il est évident qu'elles ne peuvent jamais être compatibles si $p \neq 1$. Ceci signifie donc, que dans ce cas, il est impossible d'obtenir les caractéristiques de l'état fondamental et du premier état excité conjointement.

Alors, les relations (3.71) et (3.72) donneront l'énergie et la fonction propre correspondante du premier état excité de la famille de potentiels définis par

$$V_1^{(p<1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') = cr^{-2p} + \sigma\sqrt{c}\left(3p - 3 - \sqrt{4h_1 + 1}\right)r^{-p-1} + d_1r^{-2} + 2\sigma\sqrt{car^{-p+1}} + ar^2 \\ + 2\sigma'\sqrt{far^{p+1}} - \sigma'\sqrt{f}\left(3p + 3 + \sqrt{4h_1 + 1}\right)r^{p-1} + fr^{2p}. \quad (3.77)$$

3.4.2 Exemple illustratif

Considérons le cas correspondant à $a = c = f = 2$, $l = 0$, $d_1 = 1$, $p = 1/2$. Dans ce cas le potentiel correspondant sont donnés par

$$V_1^{(\frac{1}{2})}(r, X_1, \sigma') = 2r^{-1} + \sigma\sqrt{2} \left(-3/2 - \sqrt{5} \right) r^{-3/2} + r^{-2} + 4\sigma r^{1/2} + 2r^2 + 4\sigma' r^{3/2} + 2r^1 - \sigma' \sqrt{2} \left(9/2 + \sqrt{5} \right) r^{-1/2}. \quad (3.78)$$

L'énergie propre de son premier état excité est

$$E_{\frac{1}{2},1}^{(1)}(x_1, \sigma, \sigma') = \sqrt{2} \left(6 + \sqrt{5} \right) - 4\sigma\sigma', \quad (3.79)$$

et la fonction propre correspondante, normalisées à 1, est

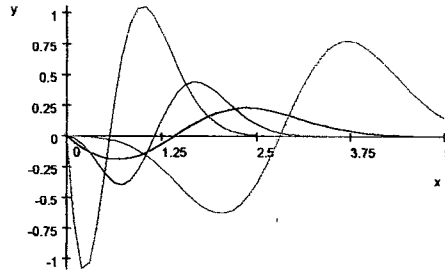
$$\Psi_{\frac{1}{2},1}^{(1)}(r, X_1, \sigma, \sigma') = N_{\sigma,\sigma'} \left[- \left(2 + \sqrt{5} \right) r^{-1} + 2\sqrt{2}r + 2\sigma\sqrt{2}r^{-1/2} + 2\sigma'\sqrt{2}r^{1/2} \right] \quad (3.80)$$

$$\times r^{\frac{1}{2}(3+\sqrt{5})} \exp \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}r^2 - 2\sqrt{2}\sigma r^{1/2} - \frac{2\sqrt{2}}{3}\sigma' r^{3/2} \right), \quad (3.81)$$

avec

$$N_{1,1} \simeq \frac{1}{0.0457}, \quad N_{1,-1} \simeq \frac{1}{0.22}, \quad N_{-1,1} \simeq \frac{1}{10.052}, \quad N_{-1,-1} \simeq \frac{1}{1127.837} \quad (3.82)$$

Les allures des fonctions propres sont représentées sur la figure ci-dessous



Rouge : $\sigma = \sigma = 1$; Noire : $\sigma = -\sigma = 1$; Bleue : $\sigma = -\sigma = -1$; Verte : $\sigma = \sigma = -1$

3.4.3 Propriétés du premier état excité pour $p > 1$.

Dans ce cas, on remplace les paramètres β , γ et η , α par leur expressions (3.43), (3.44), (3.45) et (3.46). On obtient

$$R(X_1) = 2\sqrt{a}, \quad (3.82)$$

$$b_2 = b_1 + 2p\sqrt{c}, \quad (3.83)$$

$$k_2 = k_1 + 2p\sqrt{f}, \quad (3.84)$$

et

$$h_2 = h_1 + 1 + \sigma\sqrt{4h_1 + 1}, \quad (3.85)$$

ou bien

$$4h_2 + 1 = \left(\sigma\sqrt{4h_1 + 1} + 2\right)^2 \quad (3.86)$$

En reportant les équations (3.52), (3.43), (3.82), (3.86) dans (3.64), on arrive à l'expression de l'énergie du premier état excité sous la forme

$$E_{p>1,1}^{(1)}(X_1, \sigma) = \sqrt{a} \left(\sqrt{4h_1 + 1} + 2(2 + \sigma) \right) + 2\sqrt{fc}, \quad (3.87)$$

et celle de la fonction propre correspondante sous la forme

$$\begin{aligned} \Psi_{p>1,1}^{(1)}(r, X_1, \sigma) \propto & \left[- \left(\sigma + 1 + \frac{(\sigma + 1)}{2} \sqrt{4h_1 + 1} \right) r^{-1} + 2\sqrt{ar} - 2\sqrt{cr}^{-p} + 2\sqrt{fr}^p \right] \\ & \times r^{\frac{1}{2}(1+2\sigma+\sqrt{4h_1+1})} \exp \left(-\frac{\sqrt{a}}{2} r^2 - \frac{\sqrt{c}}{p-1} r^{-p+1} - \frac{\sqrt{f}}{p+1} r^{p+1} \right) \end{aligned} \quad (3.88)$$

Les deux contraintes s'obtiennent dans ce cas à partir de (3.47) et (3.48) en remplaçant b_1 par b_2 , k_1 par k_2 et h_1 par h_2 . On obtient

$$b_2 = \sqrt{c} \left(\sigma\sqrt{4h_2 + 1} + 1 - p \right), \quad (3.89)$$

et

$$k_2 = -\sqrt{f} \left(\sigma\sqrt{4h_2 + 1} + 1 + p \right) \quad (3.90)$$

En reportant (3.83), (3.84) et (3.86), dans les équations (3.89) et (3.90), on obtient

$$b_1 = \sqrt{c} \left(\sqrt{4h_1 + 1} - 2\sigma + 1 - 3p \right), \quad (3.91)$$

et

$$k_1 = -\sqrt{f} \left(\sqrt{4h_1 + 1} + 2\sigma + 1 + 3p \right). \quad (3.92)$$

Le potentiel s'écrit comme

$$\begin{aligned} V_1^{(p>1)}(r, x_1, \sigma) = & cr^{-2p} + \sqrt{c} \left(\sqrt{4h_1 + 1} - 2\sigma + 1 - 3p \right) r^{-p-1} + h_1 r^{-2} - 2\sqrt{ac} r^{-p+1} \\ & + ar^2 + 2\sqrt{af} r^{p+1} - \sqrt{f} \left(\sqrt{4h_1 + 1} + 2\sigma + 1 + 3p \right) r^{p-1} + fr^{2p}. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Finalement, on identifie les deux contraintes (3.47) et (3.91), on trouve que la valeur b_1 a deux valeurs différentes, même chose par rapport aux contraintes (3.48) et (3.92), on trouve que k_1 a deux valeurs différentes, ainsi, on n'a pas pu obtenir la compatibilité entre les caractéristiques de l'état fondamental et celles du premier état excité.

En effet, dans ce travail, à partir notre essaie de créer une compatibilité entre les caractéristiques de l'état fondamental et du premier état excité. Malheureusement, on n'a pas pu obtenir la compatibilité, mais il reste un grand intérêt qui est l'obtention de l'énergie et la fonction d'onde pour l'état fondamentale et le premier état excité. Surtout l'énergie est la chose la plus importante dans la nature et pour la physique en particulier.

Le plus important dans cette étude des potentiels qui sont de l'ordre p , c'est que on peut varier chaque fois la valeur de p , pour obtenir les énergies et les fonctions d'onde, et c'est ça le plus important dans l'obtention du multitude du potentiels centraux singuliers qui ont une très grande importance dans la modélisation de certaines interactions en physique nucléaire, physique des particule et physique du solide.

3.4.4 Exemple illustratif

Considérons le cas où $c = f = a = 2$, $l = 0$, $d = 1$ et $p = 3$ dans ce cas le potentiel s'écrit

$$V_1^{(3)}(r, X_1, \sigma) = 2r^{-6} + \sqrt{2}(\sqrt{5} - 2\sigma - 8)r^{-4} - 3r^{-2} + \left[2 - \sqrt{2}(\sqrt{5} + 2\sigma + 10)\right]r^2 + 4r^4 + 2r^6. \quad (3.95)$$

L'énergie du premier état excité est alors donnée par

$$E_{3,1}^{(1)}(X_1, \sigma) = \sqrt{2}(\sqrt{5} + 2(2 + \sigma)) + 4. \quad (3.96)$$

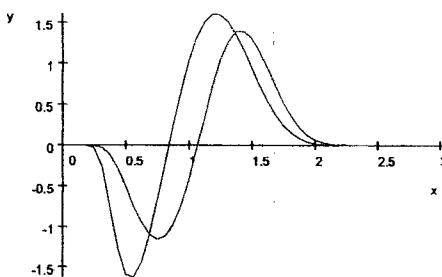
Et la fonction propre correspondante est

$$\Psi_{3,1}^{(1)}(r, X_1, \sigma) = N_\sigma \left[-\left(\sigma + 1 + \frac{(\sigma + 1)}{2}\sqrt{5}\right)r^{-1} + 2r - 2r^{-3} + 2\sqrt{2}r^3 \right] \times r^{\frac{1}{2}(1+2\sigma+\sqrt{5})} \exp\left(-\frac{1}{2}r^2 - \frac{1}{2}r^{-2} - \frac{\sqrt{2}}{4}r^4\right), \quad (3.97)$$

avec

$$N_1 \simeq \frac{1}{0.6491}, \quad N_{-1} \simeq \frac{1}{0.6480}. \quad (3.98)$$

Les allures des fonctions d'onde sont représentées sur la figure ci-dessous



Rouge : $\sigma = 1$; Bleue : $\sigma = 1$.

La courbe montre l'existence d'un nœuds et par conséquent elle représente bien la fonction d'onde du premier état excité.

Chapitre 4

Etude par la supersymétrie d'une famille de potentiels singuliers, PT symétriques

4.1 Introduction

Comme on a vu, au chapitre 2, les Hamiltoniens non Hermitiens présentent un grand intérêt de nos jours, puisqu'ils se retrouvent dans plusieurs branches de la physique [27]. Nous avons aussi vu que la construction d'une théorie quantique générale, pour ces Hamiltoniens, n'existe pas. Pour les Hamiltoniens PT symétriques, dont la symétrie n'est pas brisée, on peut construire une théorie quantique spécifique pour chaque Hamiltonien à condition que l'opérateur C , représentant la symétrie cachée (appelée conjugaison de charge) est connu (voir chapitre 5). La construction de cette théorie repose essentiellement sur la connaissance des fonctions propres et des valeurs propres associées de l'Hamiltonien. Ainsi, on est confronté de prime à bord au problème de la résolution de l'équation aux valeurs propres de Schrödinger. Pour cela, on pourrait se demander si les techniques connues pour résoudre l'équation de Schrödinger en mécanique quantique usuelle demeurent applicables dans le cas d'une théorie PT symétrique.

L'approche de la supersymétrie en mécanique quantique usuelle pour chercher les valeurs propres et fonctions propres d'Hamiltoniens Hermitiens peut être généralisée pour traiter des

problèmes avec des Hamiltoniens PT symétriques, si la symétrie n'est pas brisée. En effet, puisque pour ces Hamiltonien le spectre est réel, il peut donc être ordonné et on peut reprendre toutes les démarches présentées dans le chapitre 1 pour aboutir à des relations semblables.

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à l'application de cette approche pour résoudre l'équation aux valeurs propres de la famille de potentiels singuliers du chapitre 3 dans le cas où les paramètres du potentiel sont tel que ce dernier n'est pas réel mais PT symétrique. Bien entendu, dans cette nouvelle étude, et pour ne pas trop compliquer les choses, on admettra qu'on a des potentiels à une dimension de l'espace et que leurs spectres sont discrets.

4.2 Approche de la supersymétrie pour les potentiels PT symétriques

Considérons l'équation de Schrödinger stationnaire pour une particule à une dimension

$$H\Psi(x) = E\Psi(x), \quad (4.1)$$

avec

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x, a_0), \quad (4.2)$$

où le potentiel $V(x, a_0)$ dépend d'un ensemble de paramètres complexes a_0 .

Par conséquent l'Hamiltonien n'est pas Hermitien mais on admettra néanmoins qu'il est PT symétrique,

$$PT H = HPT. \quad (4.3)$$

Autrement dit, $V(x, a_0)$ est tel que

$$\begin{aligned} V(x, a_0) &= V^*(-x, a_0) = V(-x, a_0^*) \\ &= (PT)V(x, a_0)(PT)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

On définit le nouveau Hamiltonien $H_0(x, a)$ par

$$H_0(x, a_0) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V_0(x, a_0), \quad (4.5)$$

avec

$$V_0(x, a_0) = V(x, a_0) - E_0(a_0), \quad (4.6)$$

où $E_0(a_0)$ est pour le moment une constante "réelle" choisie de telle sorte que le nouveau Hamiltonien H_0 puisse être factorisé comme

$$H_0(x, a_0) = B(x, a_0) A(x, a_0). \quad (4.7)$$

On peut se rendre compte qu'on peut choisir A et B sous la forme

$$\begin{cases} A = \frac{d}{dx} + W(x, a_0) \\ B = -\frac{d}{dx} + W(x, a_0) \end{cases}, \quad (4.8)$$

où $W(x, a_0)$ est une fonction complexe, satisfaisant à l'équation de Riccati

$$V_0(x, a_0) = W^2(x, a_0) - W'(x, a_0). \quad (4.9)$$

Donc, l'opérateur B n'est pas l'adjoint de A au sens de la mécanique quantique. Cependant de (4.3), (4.4) et (4.6), il découle que le superpotentiel doit être anti- PT symétrique, c'est-à-dire

$$W(x, a_0) = -W^*(-x, a_0), \quad (4.10)$$

qui signifie que $W(x, a_0)$ anti-commute avec PT

$$(PT)W(x, a_0)(PT)^{-1} = -W(x, a_0). \quad (4.11)$$

Ceci entraîne aussi que les opérateurs A et B sont anti- PT symétriques

$$(PT)A(PT)^{-1} = -A, \quad (4.12)$$

et

$$(PT)B(PT)^{-1} = -B. \quad (4.13)$$

Mis à part ces observations, tout le développement du chapitre (1) demeure également valide

valide ici. En particulier, si $\Psi_0(x, a_0)$ est solution de l'équation $A\Psi_0(x, a_0) = 0$, le superpotentiel est alors donné par

$$W(x, a_0) = -\frac{\Psi_0'(x, a_0)}{\Psi_0(x, a_0)}. \quad (4.14)$$

$\Psi_0(x, a_0)$ représente alors la fonction propre de l'état fondamental et elle est donnée par

$$\Psi_0(x, a_0) = N_0 \exp\left(-\int_0^x W(y, a_0) dy\right), \quad (4.15)$$

N_0 est une constante de normalisation.

Si le potentiel est supersymétrique, c'est-à-dire invariant de forme, les formules du chapitre 1 devraient être applicables ici.

4.3 Supersymétrie et Brisure de la symétrie PT

Comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, la non brisure de la symétrie PT est une condition suffisante pour que le spectre d'un Hamiltonien PT symétrique soit réel. Nous allons montrer dans cette section que, pour tout Hamiltonien PT symétrique et supersymétrique, la symétrie PT est non brisée.

A partir de (4.15), on voit que l'action de PT sur les deux membres donne

$$\begin{aligned} \Psi_0^*(-x, a_0) &= N_0^* \exp\left(-\int_0^{-x} W^*(y, a_0) dy\right) \\ &= N_0^* \exp\left(-\int_0^x W^*(-y, a_0) d(-y)\right) \\ &= N_0^* \exp\left(-\int_0^x W(y, a_0) dy\right), \end{aligned} \quad (4.16)$$

où dans la deuxième étape on fait le changement de variable $y \rightarrow -y$, et dans la troisième étape on utilise (4.10). Ainsi, si on choisit N_0 réel, on aboutit à

$$\Psi_0^*(-x, a_0) = \Psi_0(x, a_0), \quad (4.17)$$

et par conséquent l'état fondamental est PT symétrique.

On peut généraliser ce résultat pour tous les états lorsque le potentiel est invariant de forme.

En effet, on a vu dans le chapitre (1) que si le potentiel est invariant de forme, la fonction propre du $m^{\text{ème}}$ état excité est donnée par

$$\Psi_m(x, a_0) = N_m B(a_0) B(a_1) \cdots B(a_{m-1}) \Psi_0(x, a_m) \quad (4.18)$$

$$= N_m \left[\prod_{i=0}^{m-1} B(a_i) \right] \Psi_0(x, a_m) \text{ pour } m \geq 1. \quad (4.19)$$

En agissant sur les deux membres à gauche par PT et tenant compte du résultat (4.17), on obtient

$$\Psi_m^*(-x, a_0) = N_m^* (PT) \left[\prod_{i=0}^{m-1} B(a_i) \right] (PT)^{-1} \Psi_0(x, a_m).$$

Or, on a

$$\begin{aligned} (PT) \left[\prod_{i=0}^{m-1} B(a_i) \right] (PT)^{-1} &= \prod_{i=0}^{m-1} [(PT) B(a_i) (PT)^{-1}] \\ &= (-1)^m \prod_{i=0}^{m-1} B(a_i), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé le résultat (4.13). Ainsi, on obtient

$$\Psi_m^*(-x, a_0) = (-1)^m N_m^* \left[\prod_{i=0}^{m-1} B(a_i) \right] \Psi_0(x, a_m).$$

Ainsi, si on veut que $\Psi_m(x, a_0)$ soit invariant par PT , il faut fixer la phase de N_m de telle sorte à avoir $N_m = (-1)^m N_m^*$. Donc

$$\arg N_m = m \frac{\pi}{2}.$$

Ainsi, on vient de montrer que si un Hamiltonien PT symétrique est aussi supersymétrique, c'est-à-dire si le potentiel est invariant de forme, alors toutes les fonctions propres sont invariantes par la symétrie PT et par conséquent, cette symétrie n'est pas brisée. A notre connaissance, ce résultat, très important, n'a pas été signalé dans la littérature.

4.4 Construction d'une famille de potentiels PT symétriques

Considérons par exemple la famille de potentiels du chapitre 3, dans le cadre d'une seule dimension d'espace

$$v^{(p)}(x; X) = cx^{-2p} + bx^{-p-1} + dx^{-2} + gx^{-p+1} + ax^2 + ex^{p+1} + fx^{2p} + kx^{p-1}, \quad (4.20)$$

mais dans le cas plus général où l'ensemble des paramètres du potentiel, caractérisés par X , peuvent prendre des valeurs complexes.

Si l'on veut que $v^{(p)}(x; X)$ soit PT symétrique, c'est-à-dire $v^{(p)}(x; X) = v^{(p)}(-x; X^*)$, alors a et d doivent être des paramètres réels et les autres doivent vérifier

$$c = c^* (-1)^{-2p}, \quad f = f^* (-1)^{2p}, \quad b = b^* (-1)^{-p-1}, \quad g = g^* (-1)^{-p+1}, \quad e = e^* (-1)^{p+1}, \quad k = k^* (-1)^{p-1}. \quad (4.21)$$

On montre facilement que les arguments de ces paramètres doivent être donnés par

$$\arg c, \arg f = \pm p\pi, \quad \arg b, \arg e = \pm (1+p) \frac{\pi}{2} \quad \text{et} \quad \arg g, \arg k = \pm (1-p) \frac{\pi}{2}. \quad (4.22)$$

Dans ce travail, nous n'allons pas traiter le cas général, où p est un paramètre positif réel mais plutôt, nous nous intéressons seulement au cas où p est un nombre entier positif, $p \in \mathbb{N}$. Cependant, si p est impair, les arguments des paramètres concernés dans (4.22) sont tous des multiples de π , ce qui entraîne que le potentiel dans ce cas est réel et par conséquent on revient à l'étude faite dans le chapitre (3). Si p est pair, les arguments de c et f sont aussi des multiples de π , mais ceux de b, e, g et k sont des multiples impaires de $\frac{\pi}{2}$. Ainsi, dans ce dernier cas les potentiels correspondants sont complexes et PT symétriques.

Nous avons donc construits une famille de potentiels PT symétriques et singuliers, donnés par

$$V^{(n)}(x; X) = cx^{-4n} + ibx^{-2n-1} + dx^{-2} + igx^{-2n+1} + ax^2 + iex^{2n+1} + fx^{4n} + ikx^{2n-1}, \quad (4.23)$$

où $i^2 = -1$, n est un paramètre entier positif, $n \in \mathbb{N}$, et tous les autres paramètres sont réels.

4.5 Recherche de valeurs propres et fonctions propres

Dans le cas de potentiels complexes et PT symétriques, il n'existe pas de recettes pour savoir si l'Hamiltonien associé possède des états liés ou pas, comme c'était le cas dans l'étude faite au chapitre (3) concernant des potentiels réels. Autrement dit, on ne peut pas imposer les contraintes nécessaires aux paramètres du potentiel qui conduisent à l'existence d'états liés. Ici, nous allons par contre admettre l'existence de tels états, du moins pour certains choix des paramètres, et essayons de déterminer leurs caractéristiques par l'approche de la supersymétrie. Nous vérifierons par la suite que la symétrie n'est pas brisée en s'assurant que les états propres obtenus sont invariants par le produit PT .

4.5.1 Caractéristiques de l'état fondamental conditionnel

Pour déterminer les caractéristiques de l'état fondamental de l'Hamiltonien associé au potentiel général (3), nous allons utiliser donc les techniques de l'approche de la supersymétrie. On peut obtenir le potentiel supersymétrique directement à partir des résultats du chapitre (3), en remplaçant r par x et p par $2n$. Ainsi, on obtient à partir de (3.11)

$$W(x, X) = \frac{x}{x} + \beta x + \frac{\gamma}{x^{2n}} + \eta x^{2n}, \quad (4.24)$$

où maintenant, d'après le résultat (4.10), α et β sont des paramètres réels alors que γ et η sont des paramètres purement imaginaires, qui seront déterminés à partir de l'équation de Riccati en fonction des paramètres du potentiel (4.23). En effet, l'équation de Riccati s'écrit ici

$$V^{(n)}(x, X) = W^2(x, X) - W'(x, X) + E_{n,0}(X), \quad (4.25)$$

dont l'identification des termes de même puissance conduit aux relations suivantes :

$$\beta^2 = a, \quad (4.26)$$

$$\gamma^2 = c, \quad (4.27)$$

$$\eta^2 = f, \quad (4.28)$$

$$\alpha + \alpha^2 = d, \quad (4.29)$$

$$\beta - 2\gamma\eta - 2\alpha\beta = E_{n,0}(X), \quad (4.30)$$

$$(2\alpha_1 + 2n)\gamma = ib, \quad (4.31)$$

$$(2\alpha - 2n)\eta = ik, \quad (4.32)$$

$$2\beta\gamma = ig, \quad (4.33)$$

$$2\beta\eta = ie. \quad (4.34)$$

Pour déterminer α, β, γ et l'énergie $E_{n,0}(X)$, on utilisera les équations (4.26)-(4.30). Les équations restantes, (4.31)-(4.34), serviront comme contraintes sur les paramètres du potentiel.

En analysant ce système d'équations, il est clair que pour obtenir une symétrie PT non brisée, avec une énergie réelle pour l'état fondamental, il faut que γ et η soient imaginaires purs ou nuls, alors que α et β doivent être réels, comme on s'y attendait. Pour satisfaire les contraintes sur β, γ et η il faut que c et f soient négatifs ou nuls et a soit positif ou nul. Ainsi, on doit exiger que

$$c \leq 0, \quad f \leq 0, \quad a \geq 0. \quad (4.35)$$

Si les contraintes (4.35) sur les paramètres du potentiel ne sont pas satisfaites, on ne peut pas obtenir un superpotentiel et par conséquent l'approche de la supersymétrie ne s'appliquera pas.

Ainsi, on obtient

$$\beta = \pm\sqrt{a}, \quad \gamma = i\sigma\sqrt{|c|}, \quad \eta = i\sigma'\sqrt{|f|} \text{ et } \alpha = \frac{1}{2}(-1 \pm \sqrt{1 + 4d}), \quad (4.36)$$

avec $\sigma = \pm 1$ et $\sigma' = \pm 1$.

Pour que α soit réel, on doit aussi imposer à d de vérifier

$$d \geq -\frac{1}{4}. \quad (4.37)$$

La fonction propre de l'état fondamental s'écrit donc

$$\begin{aligned}\Psi_{n,0}(x, X) &= N_0 \exp\left(-\int W(z, X) dz\right) \\ &= N_0 \exp\left(-\alpha \ln|x| - \frac{\beta x^2}{2} + \frac{\gamma}{2n-1} x^{-2n+1} - \frac{\eta}{2n+1} x^{2n+1}\right),\end{aligned}\quad (4.38)$$

où N_0 est une constante de normalisation, qu'on choisira réelle.

Puisque γ et η sont imaginaires purs et, α et β sont réels, il est aisé de se rendre compte que la fonction $\Psi_{n,0}(x, X)$ est invariante par l'opération PT ,

$$PT\Psi_{n,0}(x, X) = \Psi_{n,0}(x, X),\quad (4.39)$$

ce qui confirme le résultat dérivé dans la section précédente. Par ailleurs sa norme est donnée par

$$\begin{aligned}(\Psi_{n,0}, \Psi_{n,0})_{PT} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx [PT\Psi_{n,0}(x, X)] \Psi_{n,0}(x, X) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx [\Psi_{n,0}(x, X)]^2 \\ &= N_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(-2\alpha \ln|x| - \beta x^2 + \frac{2\gamma}{2n-1} x^{-2n+1} - \frac{2\eta}{2n+1} x^{2n+1}\right) \\ &= N_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp(-2\alpha \ln|x| - \beta x^2) \cos\left[\frac{2|c|}{2n-1} x^{-2n+1} - \frac{2|f|}{2n+1} x^{2n+1}\right]\end{aligned}\quad (4.40)$$

Pour que cette intégrale converge, il faut choisir $\alpha < 0$ et $\beta > 0$. Ainsi, on doit prendre

$$\alpha = -\frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 4d}),\quad (4.41)$$

et

$$\beta = \sqrt{a} \text{ avec } a > 0.\quad (4.42)$$

Avec ce choix des paramètres, on est assuré que la fonction propre possède une norme finie. Cependant, à cause de la fonction cosinus dans l'intégrale (4.40) il n'est pas possible d'affirmer que son signe est positif ou négatif. A priori, il dépendra des valeurs des paramètres du potentiel. Ainsi, nous vérifions sur cet exemple le résultat du chapitre 2, stipulant que les

normes des fonctions propres d'un Hamiltoniens PT symétrique ne sont pas définies positives, sans l'incorporation de la symétrie de charge cachée.

Enfin, en se servant des contraintes (4.31)-(4.34), la famille de potentiels peut être réécrite en fonction des paramètres pertinents comme

$$V^{(n)}(x; X, \sigma, \sigma') = -|c|x^{-4n} + i\sigma\sqrt{|c|} \left(2n - 1 + \sqrt{1 + 4d}\right) x^{-2n-1} + dx^{-2} + 2i\sigma\sqrt{a|c|}x^{-2n+1} + ax^2 + 2i\sigma'\sqrt{a|f|x^{2n+1}} - |f|x^{4n} - i\sigma'\sqrt{|f|} \left(2n + 1 + \sqrt{1 + 4d}\right) x^{2n} \quad (4.43)$$

La fonction propre de l'état fondamental est donnée par

$$\Psi_{n,0}(x, X, \sigma, \sigma') = N_0 \exp \left(\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 + 4d}) \ln |x| - \frac{\sqrt{a}x^2}{2} + i \frac{\sigma\sqrt{|c|}}{2n-1} x^{-2n+1} - i \frac{\sigma'\sqrt{|f|}}{2n+1} x^{2n+1} \right), \quad (4.44)$$

et l'énergie correspondante est donnée, d'après la relation (4.30), par

$$E_{n,0}(X, \sigma, \sigma') = \sqrt{a} \left(2 + \sqrt{1 + 4d}\right) + 2\sigma\sigma'\sqrt{|c||f|}. \quad (4.45)$$

On remarque que l'énergie dépend de tous les paramètres du potentiel (4.43) sauf n .

4.5.2 Exemples illustratifs

Premier exemple

Considérons le cas où $n = 0$, avec $N_0 = a = c = f = 1$, $d = 0$ et $\sigma = \sigma' = 1$. Le potentiel correspondant s'écrit donc

$$V^{(0)}(x) = -2 - 4ix^{-1} + 4ix + x^2. \quad (4.46)$$

Son état fondamental est caractérisé par la fonction d'onde

$$\Psi_{0,0}(x) = \exp \left(\ln |x| - \frac{x^2}{2} + -2ix \right), \quad (4.47)$$

d'énergie

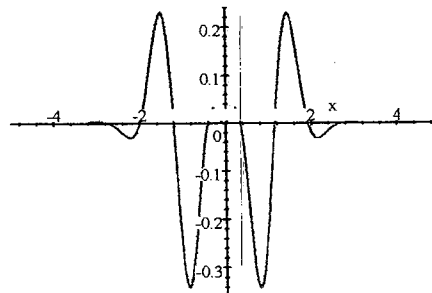
$$E_{0,0} = 5. \quad (4.48)$$

En utilisant le Maple, on peut calculer approximativement la norme PT de $\Psi_{0,0}$,

$$\begin{aligned} (\Psi_{0,0}, \Psi_{0,0})_{PT} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \exp(-x^2) \cos 4x \cdot \\ &= -0.11362, \end{aligned} \quad (4.49)$$

qui est donc négative.

L'allure de $x^2 \exp(-x^2) \cos 4x$ est donnée sur la figure suivante :



Deuxième exemple

Considérons les mêmes valeurs précédentes mais pour $n = 1$. Le potentiel est alors donné par

$$v^{(2)}(x) = -x^{-4} + 2ix^{-1} + x^2 + 2ix^3 - x^4 - 4ix.$$

La fonction propre de l'état fondamental est

$$\Psi_{2,0}(x) = \exp\left(\ln|x| - \frac{x^2}{2} + ix^{-1} - \frac{i}{3}x^3\right)$$

et l'énergie correspondante est évidemment

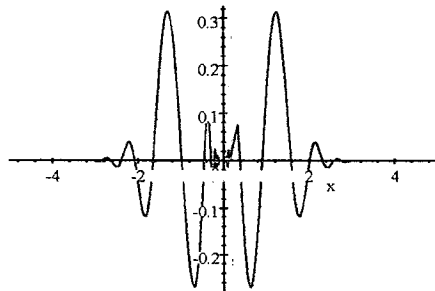
$$E_{2,0}(X) = 5.$$

Le calcul de la norme de $\Psi_{2,0}$ à l'aide de Maple donne

$$\begin{aligned}(\Psi_{2,0}, \Psi_{2,0})_{PT} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 \exp(-x^2) \cos\left(2x^{-1} - \frac{2}{3}x^3\right) \\ &= 5.1534 \times 10^{-2}.\end{aligned}$$

Pour cet exemple, la norme de l'état fondamental est bien positive.

L'allure de $x^2 \exp(-x^2) \cos\left(2x^{-1} - \frac{2}{3}x^3\right)$ est donnée sur la figure suivante :



Chapitre 5

Etude de la symétrie CPT pour des Hamiltoniens à trois et quatre niveaux d'énergie

5.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons nous intéresser à la détermination des valeurs propres et fonctions propres de deux familles d'Hamiltoniens PT symétriques, respectivement à trois et quatre niveaux et dépendant d'un paramètre réel. Ces Hamiltoniens peuvent être vus comme des Hamiltoniens qui représentent par exemple la dynamique d'une particule quantique qui peut occuper trois ou quatre positions sur l'axe OX , symétriques par rapport à l'origine. On trouve dans la littérature des études similaires mais qui concernent seulement des Hamiltoniens à deux niveaux [9, 28]. A cause du fait que pour des matrices assez générales, les expressions des valeurs propres et fonctions propres correspondantes sont très complexes, conduisant à des calculs trop gênants, nous avons choisi des représentations assez simples pour que les développements des calculs ne soit trop encombrants. Ainsi, dans ce travail, nous présentons les techniques et principes des calculs, qui resteront les mêmes pour des représentations plus générales.

5.2 Etude d'un Hamiltonien PT symétrique à trois niveaux

5.2.1 Présentation du modèle

Considérons le modèle d'une particule quantique qui peut occuper sur l'axe OX les points d'abscisses $x = 0, x = 1$ et $x = -1$. Ainsi, la dynamique d'une telle particule pourra être décrite par un Hamiltonien qui sera représenté par une matrice 3×3 . Dans la représentation position on a juste trois vecteurs. Par exemple, on peut noter ces vecteurs comme $|i\rangle, i = 0, \pm 1$ où l'indice désigne la position réelle sur l'axe. Ainsi, on a

$$H_{ij} = \langle i | H | j \rangle \equiv H(x_i, x_j). \quad (5.1)$$

Dans la base standard, on peut représenter par exemple les vecteurs $|i\rangle$ comme

$$|-1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (5.2)$$

On choisit notre matrice représentative de l'Hamiltonien dans cette base standard sous la forme

$$H(\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

avec $\theta \in [0, \pi]$. L'adjoint H^+ de notre Hamiltonien (5.3) s'écrit donc dans la même base comme

$$\begin{aligned} H^+(\theta) &= \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & e^{i\theta} \end{pmatrix} \\ &= H(-\theta). \end{aligned} \quad (5.4)$$

5.2.2 Symétrie PT pour l'Hamiltonien choisi

Il est évident que pour $\theta \neq 0$ et π , H et H^+ ne coïncident pas et par conséquent notre Hamiltonien n'est pas Hermitien. Pour montrer qu'il est cependant PT symétrique, nous devons d'abord chercher la représentation de l'opérateur parité P dans la base standard. Pour cela, partons de la relation (A.19) de l'appendice (A) qui s'écrit ici avec les vecteurs $|i\rangle$ comme

$$P|0\rangle = |0\rangle, \quad P|1\rangle = |-1\rangle \text{ et } P|-1\rangle = |1\rangle. \quad (5.5)$$

Ainsi, l'opérateur P sera représenté dans la base standard (5.2) par la matrice 3×3

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

L'action de l'opérateur de renversement du temps sur l'Hamiltonien H donne

$$THT = H^* = \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & e^{i\theta} \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

En multipliant les deux membres de (5.7) à gauche et à droite par P et sachant que $PTHTP = (PT)H(PT)^{-1}$, on obtient

$$\begin{aligned} (PT)H(PT)^{-1} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & e^{i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} = H, \end{aligned} \quad (5.8)$$

ce qui montre que H est PT symétrique,

$$[H, PT] = 0, \quad (5.9)$$

ou bien

$$\langle -x_i | H | -x_j \rangle^* = \langle x_i | H | x_j \rangle \iff H_{-i,-j}^* = H_{i,j}. \quad (5.10)$$

5.2.3 Valeurs propres et états propres de $H(\theta)$

En faisant un calcul standard, on obtient les valeurs propres de $H(\theta)$, qui sont données par

$$\lambda_0 = 2 \cos \theta, \quad \lambda_1 = 1 \quad \text{et} \quad \lambda_2 = -1. \quad (5.11)$$

Ces valeurs propres sont donc, comme on s'y attendait, réelles.

Soient $|\lambda_2\rangle$, $|\lambda_0\rangle$ et $|\lambda_1\rangle$ les vecteurs propres correspondants respectivement aux valeurs propres λ_2 , λ_0 et λ_1 . En admettant qu'elles sont aussi vecteurs propres de l'opérateur PT , on devrait écrire

$$H |\lambda_i\rangle = \lambda_i |\lambda_i\rangle, \quad (5.12)$$

et

$$PT |\lambda_i\rangle = |\lambda_i\rangle. \quad (5.13)$$

Ainsi, si on exprime les $|\lambda_i\rangle$ dans la base standard, comme des vecteurs colonnes

$$|\lambda_i\rangle = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix}, \quad (5.14)$$

ou les paramètres x_i , y_i et z_i sont les composantes, il est évident que l'équation aux valeurs propres (5.12) permet seulement d'exprimer deux paramètres en fonction de la troisième. En mécanique quantique usuelle, le troisième paramètre est fixé en imposant aux vecteurs $|\lambda_i\rangle$ d'être normés à 1. Ainsi, on obtient des vecteurs propres définis à des phases globales près. Ici,

ces phases seront précisées de telle sorte à satisfaire la relation (5.13). Cette dernière conduit à

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \\ z_i \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i^* \\ y_i^* \\ z_i^* \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} z_i^* \\ y_i^* \\ x_i^* \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{5.15}$$

Ainsi, on doit fixer la phase des vecteurs propres de telle sorte que la composante y_i soit réelle et que les composante x_i et z_i soient conjuguées complexes l'une de l'autre.

Vecteur propre correspondant à λ_0

D'après (5.15), on doit écrire

$$|\lambda_0\rangle = \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \\ x_0^* \end{pmatrix}, \tag{5.16}$$

où y_0 est un paramètre réel. L'équation (5.12) conduit à

$$x_0 = y_0 e^{i\theta}. \tag{5.17}$$

de sorte que

$$|\lambda_0\rangle = y_0 \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \tag{5.18}$$

avec $y_0 \neq 0$.

Vecteur propre correspondant à λ_1

En posant

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_1^* \end{pmatrix}, \quad (5.19)$$

avec y_1 réel, l'équation (5.12) conduit à

$$y_1 = x_1 (1 - e^{i\theta}). \quad (5.20)$$

Puisque x_1 est arbitraire mais non nul, on peut fixer sa phase par $x_1 = i|x_1|e^{-i\frac{\theta}{2}}$. Il s'ensuit alors que

$$|\lambda_1\rangle = |x_1| \begin{pmatrix} ie^{-i\frac{\theta}{2}} \\ 2 \sin \frac{\theta}{2} \\ -ie^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}, \quad (5.21)$$

avec $|x_1| \neq 0$.

Vecteur propre correspondant à λ_2

De la même manière que précédemment, en écrivant $|\lambda_2\rangle$ comme

$$|\lambda_2\rangle = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_{-1} \\ x_2^* \end{pmatrix}, \quad (5.22)$$

et utilisant l'équation (5.12), on obtient

$$y_{-1} = -x_2 (1 + e^{i\theta}). \quad (5.23)$$

En fixant la phase de x_2 par $x_2 = |x_2| e^{-i\frac{\theta}{2}}$, il s'ensuit que

$$|\lambda_2\rangle = |x_2| \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} \\ -2 \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

avec $|x_2| \neq 0$.

5.2.4 Valeurs propres et états propres de $H^+(\theta)$

En vertu de la relation (5.4), on voit que $H^+(\theta)$ possède les mêmes valeurs propres que celles de $H(\theta)$. Les vecteurs propres s'obtiennent à partir de ceux de $H(\theta)$ en remplaçant juste θ par $-\theta$. D'où en dénotant ces vecteurs propres par $|\tilde{\lambda}_i\rangle$, on aura

$$|\tilde{\lambda}_0\rangle = y_0 \begin{pmatrix} e^{-i\theta} \\ 1 \\ e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\tilde{\lambda}_1\rangle = |x_1| \begin{pmatrix} ie^{i\frac{\theta}{2}} \\ -2 \sin \frac{\theta}{2} \\ -ie^{-i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}, \quad |\lambda_2\rangle = |x_2| \begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} \\ -2 \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.25)$$

5.2.5 Relations de bi-orthogonalisation et de fermeture

Il est bien connu que si un opérateur qui n'est pas Hermitien est diagonalisable, il n'est pas garanti que ces vecteurs propres forme une base orthonormée. Cependant, les vecteurs propres de l'opérateur et de son adjoint forme un système bi-orthogonal. Dans le cas des Hamiltoniens $H(\theta)$ et $H^+(\theta)$, le système bi-orthogonal est donné par les couples $\{|\lambda_i\rangle, |\tilde{\lambda}_j\rangle\}$.

En effet, les bras associés aux kets $|\tilde{\lambda}_j\rangle$ au sens de l'Hermiticité de la mécanique quantique usuelle sont donnés par

$$\begin{cases} \langle \tilde{\lambda}_0 | = y_0 \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 1 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} \\ \langle \tilde{\lambda}_1 | = |x_1| \begin{pmatrix} -ie^{-i\frac{\theta}{2}} & -2 \sin \frac{\theta}{2} & ie^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \\ \langle \tilde{\lambda}_2 | = |x_2| \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta} & -2 \cos \frac{1}{2}\theta & e^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \end{cases}. \quad (5.26)$$

On vérifie bien que

$$\begin{cases} \langle \tilde{\lambda}_0 | \lambda_0 \rangle = y_0^2 (2 \cos 2\theta + 1) \\ \langle \tilde{\lambda}_1 | \lambda_1 \rangle = 2 |x_1|^2 (2 \cos \theta - 1) , \\ \langle \lambda_2 | \lambda_2 \rangle = 2 |x_2|^2 (2 \cos \theta + 1) \end{cases} \quad (5.27)$$

et que

$$\langle \tilde{\lambda}_i | \lambda_j \rangle = 0 \text{ pour } i \neq j. \quad (5.28)$$

Il est bien facile de voir que pour $\theta \in [0, \pi]$, les produits scalaires $\langle \tilde{\lambda}_i | \lambda_i \rangle$ peuvent être positifs, négatifs ou nuls. Nous admettons dans la suite de ce développement que les valeurs qui annulent $\langle \tilde{\lambda}_i | \lambda_i \rangle$ sont exclues du domaine de définition. Ainsi, on prendra $\theta \in [0, \frac{\pi}{3} [\cup] \frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3} [\cup] \frac{2\pi}{3}, \pi.]$.

En admettant qu'un vecteur $|\psi\rangle$ arbitraire se décompose sur les vecteurs de base $|\lambda_i\rangle$, on écrit

$$|\psi\rangle = \sum_{i=0}^2 c_i |\lambda_i\rangle. \quad (5.29)$$

En multipliant à gauche par le bra $\langle \tilde{\lambda}_j |$ et tenant compte des relations de bi-orthogonalisation, on obtient

$$c_j = \frac{1}{\langle \tilde{\lambda}_j | \lambda_j \rangle} \langle \tilde{\lambda}_j | \psi \rangle \text{ pour } j = 0, 1, 2. \quad (5.30)$$

En insérant (5.30) dans (5.29) et tenant compte du fait que $|\psi\rangle$ est arbitraire, il est possible d'écrire la relation de fermeture sous la forme

$$\sum_{i=0}^2 \frac{1}{\langle \tilde{\lambda}_i | \lambda_i \rangle} |\lambda_i\rangle \langle \tilde{\lambda}_i | = 1. \quad (5.31)$$

Enfin, l'Hamiltonien $H(\theta)$ peut être décomposé sous la forme

$$\begin{aligned} H &= \sum_{j=0}^2 \frac{1}{\langle \tilde{\lambda}_j | \lambda_j \rangle} |\lambda_j\rangle \langle \tilde{\lambda}_j | H \sum_{k=0}^2 \frac{1}{\langle \tilde{\lambda}_k | \lambda_k \rangle} |\lambda_k\rangle \langle \tilde{\lambda}_k | \\ &= \sum_{j,k=0}^2 \frac{1}{\langle \tilde{\lambda}_j | \lambda_j \rangle} \frac{1}{\langle \tilde{\lambda}_k | \lambda_k \rangle} |\lambda_j\rangle \langle \tilde{\lambda}_k | \langle \tilde{\lambda}_j | H |\lambda_k\rangle \\ &= \sum_{j=0}^2 \frac{\lambda_j}{\langle \tilde{\lambda}_j | \lambda_j \rangle} |\lambda_j\rangle \langle \tilde{\lambda}_j | \end{aligned} \quad (5.32)$$

5.2.6 Opérateur C et symétrie CPT

Soient $\langle \lambda_i |$ les vecteurs bras associés aux kets $|\lambda\rangle$ vis-à-vis de la symétrie PT . Sous formes matricielles, ils sont simplement représentés par les transposées des matrices données par (5.18), (5.21) et (5.24), s'écrivent donc

$$\begin{cases} \langle \lambda_0 | = y_0 \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 1 & e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \\ \langle \lambda_1 | = |x_1| \begin{pmatrix} ie^{-i\frac{\theta}{2}} & 2 \sin \frac{\theta}{2} & -ie^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}, \\ \langle \lambda_2 | = |x_2| \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} & -2 \cos \frac{\theta}{2} & e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}. \end{cases} \quad (5.33)$$

Il découle alors que

$$\begin{cases} \langle \lambda_0 | = \langle \tilde{\lambda}_0 | \\ \langle \lambda_1 | = - \langle \tilde{\lambda}_1 | \\ \langle \lambda_2 | = \langle \lambda_2 | \end{cases}, \quad (5.34)$$

de sorte que

$$\begin{cases} \langle \lambda_0 | \lambda_0 \rangle = 1 + 2 \cos 2\theta \\ \langle \lambda_1 | \lambda_1 \rangle = 2(1 - 2 \cos \theta) \\ \langle \lambda_2 | \lambda_2 \rangle = 2(1 + 2 \cos \theta) \end{cases}. \quad (5.35)$$

Ainsi, le signe des normes $\langle \lambda_i | \lambda_i \rangle$ au sens de la PT symétrie dépend du paramètre θ . On peut dresser le tableau suivant :

θ	0	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	$\frac{2\pi}{3}$	π
$2(1 - 2 \cos \theta)$	-			+		+
$2(1 + 2 \cos \theta)$	+			+		-
$1 + 2 \cos 2\theta$	+			-		+

(5.36)

Il est donc clair que, quel que soit $\theta \neq \frac{\pi}{3}$ et $\theta \neq \frac{2\pi}{3}$, deux vecteurs propres sont de normes positives et le troisième est de norme négative. Ce résultat est alors compatible avec la théorie générale présentée dans le chapitre 4.

Pour la suite nous allons fixer les paramètres y_0 , $|x_1|$ et $|x_2|$ tels que l'on ait

$$|\lambda_0\rangle = \frac{1}{|1 + 2 \cos 2\theta|^{1/2}} \begin{pmatrix} e^{i\theta} \\ 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.37)$$

et

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}|1 - 2 \cos \theta|^{1/2}} \begin{pmatrix} ie^{-i\frac{\theta}{2}} \\ 2 \sin \frac{\theta}{2} \\ -ie^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}, \quad (5.38)$$

et

$$|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}|1 + 2 \cos \theta|^{1/2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta}{2}} \\ -2 \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix}. \quad (5.39)$$

De cette manière, les $|\lambda_i\rangle$ vérifient les relations d'orthonormalisation et de fermeture suivantes

$$\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \epsilon_i \delta_{ij}, \quad (5.40)$$

$$\sum_{j=0}^2 \epsilon_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j| = 1, \quad (5.41)$$

avec $\epsilon_i = \epsilon_i(\theta) = \pm 1$ conformément au tableau (5.36). On introduit donc l'opérateur C qui rétablit la positivité de la norme PT . Il peut être défini par

$$\begin{aligned} C |\lambda_i\rangle &= \epsilon_i |\lambda_i\rangle \\ &= ||\lambda_i\rangle \text{ pour } i = 0, 1, 2. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Par rapport à la symétrie CPT , les vecteurs $||\lambda_i\rangle$ forment une base orthonormée,

$$\langle \lambda_j || \lambda_i \rangle = \delta_{ij} \text{ pour } i = 0, 1, 2, \quad (5.43)$$

et

$$\sum_{i=0}^2 ||\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|| = 1, \quad (5.44)$$

où le bra $\langle \lambda_i |$ est représenté par la matrice ligne transposée de la matrice colonne du ket représentant $|\lambda_i\rangle$.

L'Hamiltonien peut être représenté comme

$$\begin{aligned} H &= \sum_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| H \sum_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j| \\ &= \sum_i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|, \end{aligned} \quad (5.45)$$

ou encore

$$H = \sum_i \lambda_i \varepsilon_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|, \quad (5.46)$$

où l'on a tenu compte de l'équation aux valeurs propres (5.12) et de (5.43).

En multipliant les deux membres de (5.42) par le bra $\langle \lambda_i |$ ou par $\varepsilon_i(\theta) \langle \lambda_i |$ et sommant, et compte tenu de (5.44), on obtient

$$C = \sum_i \varepsilon_i(\theta) |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|, \quad (5.47)$$

ou encore

$$C = \sum_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|. \quad (5.48)$$

Propriétés de l'opérateur C

Puisque $(|\lambda_i\rangle)^+ \neq \langle \lambda_i|$ en général, alors d'après la définition (5.44) l'opérateur C n'est pas Hermitien. Il est représenté par une matrice complexe. Aussi, d'après (5.44) toujours, il est clair que le carré de l'opérateur C est égal à l'unité

$$C^2 = 1. \quad (5.49)$$

Par ailleurs, d'après les relations (5.45) et (5.47), C et H sont représentés par des matrices diagonales dans la base engendrée par les $|\lambda_i\rangle$ à symétrie CPT . Ainsi, il est donc évident que C et H commutent.

5.2.7 Norme d'un vecteur via la symétrie CPT

En tenant compte de la symétrie C , le produit scalaire de deux vecteurs quelconques $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ sera maintenant défini comme

$$(\varphi, \psi)_{CPT} = (CPT |\varphi\rangle)^{tr} \cdot |\psi\rangle \quad (5.50)$$

Si on considère $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ dans la base engendrée par les vecteurs propres PT symétriques $|\lambda_i\rangle$, c'est-à-dire $|\psi\rangle = \sum_i a_i |\lambda_i\rangle$ et $|\varphi\rangle = \sum_i b_i |\lambda_i\rangle$, on peut écrire

$$\begin{aligned} CPT |\varphi\rangle &= \sum_i b_i^* CPT |\lambda_i\rangle \\ &= \sum_i b_i^* C |\lambda_i\rangle \\ &= \sum_i b_i^* \|\lambda_i\rangle, \end{aligned} \quad (5.51)$$

où l'on a tenu compte de l'anti-linéarité de T et de la linéarité de C .

La définition (5.50) donne

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi)_{CPT} &= \sum_j a_j \sum_i b_i^* \langle \lambda_j | \lambda_i \rangle \\ &= \sum_i a_i b_i^*. \end{aligned} \quad (5.52)$$

En particulier, on en déduit que la norme d'un vecteur quelconque est définie positive

$$(\psi, \psi)_{CPT} = \sum_i |a_i|^2 \geq 0.$$

5.2.8 Expression explicite de l'opérateur C

La forme explicite de C peut être obtenue en utilisant (5.47) et les expressions matricielles des $|\lambda_i\rangle$ et $\langle \lambda_i|$, données par les vecteurs colonnes (5.37, (5.38), (5.39) et les vecteurs lignes correspondants.

Un calcul simple donne

$$|\lambda_0\rangle\langle\lambda_0| = \frac{1}{|1+2\cos 2\theta|} \begin{pmatrix} e^{2i\theta} & e^{i\theta} & 1 \\ e^{i\theta} & 1 & e^{-i\theta} \\ 1 & e^{-i\theta} & e^{-2i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.53)$$

$$|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| = \frac{1}{2|1-2\cos\theta|} \begin{pmatrix} -e^{-i\theta} & 2i\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\theta}{2}} & 1 \\ 2i\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\theta}{2}} & 4\sin^2\frac{\theta}{2} & -2i\sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\theta}{2}} \\ 1 & -2i\sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\theta}{2}} & -e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.54)$$

et

$$|\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| = \frac{1}{2|1+2\cos\theta|} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & -2\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\theta}{2}} & 1 \\ -2\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\theta}{2}} & 4\cos^2\frac{\theta}{2} & -2\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\theta}{2}} \\ 1 & -2\cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\theta}{2}} & e^{i\theta} \end{pmatrix} \quad (5.55)$$

La somme des membres de droite des expressions (5.53), (5.54) et (5.55) conduit à une matrice trop encombrante. En s'intéressant à chaque intervalle du tableau (5.36) séparément, on aboutit à des expressions plus simples.

Expression de C sur l'intervalle $\theta \in [0, \frac{\pi}{3}[$

$$C = \frac{1}{2\cos\theta - 1} \begin{pmatrix} e^{i\theta} - 1 & -e^{-i\theta} + 1 & 1 \\ -e^{-i\theta} + 1 & 1 & -e^{i\theta} - 1 \\ 1 & e^{i\theta} - 1 & e^{-i\theta} - 1 \end{pmatrix}. \quad (5.56)$$

Expression de C sur l'intervalle $\theta \in]\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}[$

$$C = \frac{1}{(1-4\cos^2\theta)} \begin{pmatrix} e^{2i\theta} - e^{-2i\theta} - 1 & 2e^{i\theta} & 2 \\ 2e^{i\theta} & 1 - 2\cos 2\theta & 2e^{-i\theta} \\ 2 & 2e^{-i\theta} & e^{-i\theta} - 1 \end{pmatrix}. \quad (5.57)$$

Expression de C sur l'intervalle $\theta \in]\frac{2\pi}{3}, \pi]$

$$C = \frac{1}{1 + 2 \cos \theta} \begin{pmatrix} e^{i\theta} + 1 & e^{-i\theta} - 1 & -1 \\ e^{-i\theta} - 1 & -1 & e^{i\theta} + 1 \\ -1 & e^{i\theta} + 1 & e^{-i\theta} + 1 \end{pmatrix}. \quad (5.58)$$

5.3 Etude d'un Hamiltonien PT symétrique à quatre niveaux

5.3.1 Présentation du modèle

Dans cette nouvelle étude, nous n'allons pas être trop explicite comme dans la section précédente. Puisque la démarche est la même, nous allons nous limiter à de donner les résultats sans trop de détails.

Nous choisissons un Hamiltonien H non Hermitien possédant quatre niveaux d'énergie. Comme dans la section précédente, on admettra que cet Hamiltonien H pourrait représenter la dynamique d'une particule quantique qui peut occuper quatre points symétriques sur l'axe OX , par exemple les points d'abscisses $x = -2, x = -1, x = 1, x = 2$. En représentant les vecteurs positions dans la base standard, c'est-à-dire

$$|-2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5.59)$$

l'opérateur Hamiltonien sera représenté par la matrice 4×4 suivante

$$H(\theta) = \begin{pmatrix} e^{i\theta} & 1 & 1 & 0 \\ 1 & e^{i\theta} & 0 & 1 \\ 1 & 0 & e^{-i\theta} & 1 \\ 0 & 1 & 1 & e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad (5.60)$$

avec $\theta \in [0, \pi]$.

5.3.2 Symétrie PT de l'Hamiltonien choisi

Il est évident que cet Hamiltonien n'est pas Hermitien mais PT symétrique

$$H^+ (\theta) = H (-\theta), \quad (5.61)$$

et

$$[PT; H] = 0, \quad (5.62)$$

où P est représenté par la matrice 4×4 suivante

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.63)$$

5.3.3 Valeurs propres et états propres de $H(\theta)$

Les valeurs propres de H , dénotées λ_i , sont données par

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -1, \quad \lambda_3 = 2 \cos \theta - 1, \quad \lambda_4 = 2 \cos \theta + 1. \quad (5.64)$$

Les vecteurs propres associés, qui sont simultanément vecteurs propres de PT , peuvent être choisis sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} |\lambda_1\rangle = \alpha_1 \begin{pmatrix} ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\lambda_2\rangle = \alpha_2 \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \\ |\lambda_3\rangle = \alpha_3 \begin{pmatrix} ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\lambda_4\rangle = \alpha_4 \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \end{array} \right. , \quad (5.65)$$

où les α_i sont des paramètres réels.

5.3.4 Valeurs propre et états propres de $H^+(\theta)$

Il est évident que $H^+(\theta)$ a les mêmes valeurs propres que $H(\theta)$. Les vecteurs propres PT symétriques associés à H^+ , dénotées $|\tilde{\lambda}_i\rangle$, s'obtiennent directement à partir (5.65) en remplaçant θ par $-\theta$

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tilde{\lambda}_1\rangle = \alpha_1 \begin{pmatrix} ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\tilde{\lambda}_2\rangle = \alpha_2 \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \\ |\tilde{\lambda}_3\rangle = \alpha_3 \begin{pmatrix} ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\tilde{\lambda}_4\rangle = \alpha_4 \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (5.66)$$

Les bras $\langle \tilde{\lambda}_i|$ associés aux kets $|\tilde{\lambda}_i\rangle$ au sens de la mécanique quantique usuelle seront donc donnés par

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle \tilde{\lambda}_1| = \alpha_1 \begin{pmatrix} -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} & -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} & ie^{\frac{1}{2}i\theta} & ie^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \\ \langle \tilde{\lambda}_2| = \alpha_2 \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta} & -e^{-\frac{1}{2}i\theta} & -e^{\frac{1}{2}i\theta} & e^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \\ \langle \tilde{\lambda}_3| = \alpha_3 \begin{pmatrix} -ie^{\frac{1}{2}i\theta} & ie^{\frac{1}{2}i\theta} & -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} & ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \\ \langle \tilde{\lambda}_4| = \alpha_4 \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}i\theta} & e^{\frac{1}{2}i\theta} & e^{-\frac{1}{2}i\theta} & e^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (5.67)$$

5.3.5 Relations de bi-orthogonalisation et de fermeture

Il s'ensuit que les vecteurs propres de H et H^+ sont bi-orthogonaux

$$\langle \tilde{\lambda}_i | \lambda_j \rangle = 4\alpha_i^2 \cos \theta \delta_{ij} \quad \forall i, j. \quad (5.68)$$

Pour éviter d'avoir des vecteurs avec des pseudo-normes nulles, $\langle \tilde{\lambda}_i | \lambda_i \rangle = 0$, on exclue la valeur $\theta = \frac{\pi}{2}$ de l'intervalle. Ainsi, on peut écrire une pseudo relation de fermeture sous la forme

$$\sum_i \frac{1}{4\alpha_i^2 \cos \theta} |\lambda_i\rangle \langle \tilde{\lambda}_i| = 1 \quad (5.69)$$

De plus l'Hamiltonien peut être mis sous la forme

$$H = \sum_i \frac{\lambda_i}{4\alpha_i^2 \cos \theta} |\lambda_i\rangle \langle \tilde{\lambda}_i| = 1. \quad (5.70)$$

Considérons maintenant les bras $\langle \lambda_i|$ associés aux vecteurs $|\lambda_i\rangle$ via la PT symétrie. Ils seront donnés par

$$\begin{cases} \langle \lambda_1| = -\langle \tilde{\lambda}_1| \\ \langle \lambda_2| = \langle \tilde{\lambda}_2| \\ \langle \lambda_3| = -\langle \tilde{\lambda}_3| \\ \langle \lambda_4| = \langle \tilde{\lambda}_4| \end{cases} \quad (5.71)$$

Les relations d'orthogonalisation au sens de la PT symétrie seront données par

$$\begin{cases} \langle \lambda_1 | \lambda_1 \rangle = -4\alpha_1^2 \cos \theta \\ \langle \lambda_2 | \lambda_2 \rangle = 4\alpha_2^2 \cos \theta \\ \langle \lambda_3 | \lambda_3 \rangle = -4\alpha_3^2 \cos \theta \\ \langle \lambda_4 | \lambda_4 \rangle = 4\alpha_4^2 \cos \theta \end{cases} \quad (5.72)$$

ou sous forme compacte

$$\langle \lambda_i | \lambda_i \rangle = (-1)^i 4\alpha_i^2 \cos \theta \quad \text{pour } i = 1, 2, 3, 4. \quad (5.73)$$

Il est donc clair que, pour $\theta \in [0, \frac{\pi}{2} [\cup] \frac{\pi}{2}, \pi]$, deux vecteurs parmi les quatre ont des normes PT positives alors que pour les deux autres elles sont négatives.

Ainsi, pour $\theta \in [0, \frac{\pi}{2} [\cup] \frac{\pi}{2}, \pi]$, on peut donc choisir $\alpha_i = \frac{1}{2\sqrt{|\cos \theta|}}$. Les vecteurs propres

PT symétriques s'écrivent donc

$$\left\{ \begin{array}{l} |\lambda_1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{|\cos\theta|}} \begin{pmatrix} ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\lambda_2\rangle = \frac{1}{2\sqrt{|\cos\theta|}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \\ |\lambda_3\rangle = \frac{1}{2\sqrt{|\cos\theta|}} \begin{pmatrix} ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{\frac{1}{2}i\theta} \\ ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ -ie^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix}, \quad |\lambda_4\rangle = \frac{1}{2\sqrt{|\cos\theta|}} \begin{pmatrix} e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{-\frac{1}{2}i\theta} \\ e^{-\frac{1}{2}i\theta} \end{pmatrix} \end{array} \right. \quad (5.74)$$

La relation d'orthonormalisation s'écrit alors

$$\langle \lambda_i | \lambda_i \rangle = (-1)^i \text{sign} \cos \theta, \quad \text{pour } i = 1, 2, 3, 4, \quad (5.75)$$

où $\text{sign} \cos \theta$ désigne le signe de $\cos \theta$, qui est positif pour $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}[$ et négatif pour $\theta \in]\frac{\pi}{2}, \pi]$.

5.3.6 Opérateur C et symétrie CPT

L'opérateur C qui rétabli la positivité de la norme PT sera défini par une relation semblable à (5.42). Des calculs similaires conduisent aux relations d'orthonormalisation

$$\langle \lambda_j | \lambda_i \rangle = \delta_{ij} \quad \text{pour } i = 1, 2, 3, 4 \quad (5.76)$$

$$\sum_{i=1}^4 |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i| = 1. \quad (5.77)$$

L'Hamiltonien peut être représenté comme

$$H = \sum_{i=1}^4 \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|, \quad (5.78)$$

ou encore

$$H = \text{sign} \cos \theta \sum_{i=1}^4 (-1)^i \lambda_i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|. \quad (5.79)$$

En multipliant les deux membres de (5.42) par le bra $\langle \lambda_i |$ ou par $\text{sign} \cos \theta (-1)^i \langle \lambda_i |$ et sommant, on obtient

$$C = \text{sign} \cos \theta \sum_{i=1}^4 (-1)^i |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|, \quad (5.80)$$

ou encore

$$C = \sum_{i=1}^4 |\lambda_i\rangle \langle \lambda_i|. \quad (5.81)$$

5.3.7 Expression explicite de l'opérateur C

$$|\lambda_1\rangle \langle \lambda_1| = \frac{1}{2|\cos \theta|} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} & -e^{-i\theta} & -1 & 1 \\ -e^{-i\theta} & e^{-i\theta} & 1 & -1 \\ -1 & 1 & e^{i\theta} & -e^{i\theta} \\ 1 & -1 & -e^{i\theta} & e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.82)$$

$$|\lambda_2\rangle \langle \lambda_2| = \frac{1}{2|\cos \theta|} \begin{pmatrix} -e^{-i\theta} & -e^{-i\theta} & 1 & 1 \\ -e^{-i\theta} & -e^{-i\theta} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -e^{i\theta} & -e^{i\theta} \\ 1 & 1 & -e^{i\theta} & -e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.83)$$

$$|\lambda_3\rangle \langle \lambda_3| = \frac{1}{2|\cos \theta|} \begin{pmatrix} -e^{i\theta} & e^{i\theta} & -1 & 1 \\ e^{i\theta} & -e^{i\theta} & 1 & -1 \\ -1 & 1 & -e^{-i\theta} & e^{-i\theta} \\ 1 & -1 & e^{-i\theta} & -e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (5.84)$$

et

$$|\lambda_4\rangle \langle \lambda_4| = \frac{1}{2|\cos \theta|} \begin{pmatrix} e^{i\theta} & e^{i\theta} & 1 & 1 \\ e^{i\theta} & e^{i\theta} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & e^{-i\theta} & e^{-i\theta} \\ 1 & 1 & e^{-i\theta} & e^{-i\theta} \end{pmatrix}. \quad (5.85)$$

L'opérateur C est donné par ses expressions dans les intervalles $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}[$ et $\theta \in]\frac{\pi}{2}, \pi]$.

Expression de C dans l'intervalle $\theta \in [0, \frac{\pi}{2}[$

$$C = \frac{1}{\cos \theta} \begin{pmatrix} 0 & i \sin \theta & 0 & 1 \\ i \sin \theta & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -i \sin \theta \\ 1 & 0 & -i \sin \theta & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.86)$$

Expression de C dans l'intervalle $\theta \in]-\frac{\pi}{2}, \pi]$

$$C = \frac{1}{\cos \theta} \begin{pmatrix} 0 & -i \sin \theta & 0 & 1 \\ -i \sin \theta & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \sin \theta \\ 1 & 0 & i \sin \theta & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.87)$$

Bien entendu, toutes les propriétés de C , discutées dans la section précédente et dans le chapitre 4, sont satisfaites.

Conclusion et perspectives

Dans ce travail, nous avons présenté quelques travaux concernant des sujets d'actualité en théorie quantique non relativiste, à savoir l'approche de la supersymétrie et la PT symétrie. Nous avons tout d'abord développé l'essentiel des résultats généraux de la méthode supersymétrique tout en insistant sur ceux que nous avons utilisé par la suite dans notre travail propre. Nous avons aussi donné un aperçu général sur l'état d'avancement des travaux de recherches actuels sur la construction d'une nouvelle théorie quantique, qui serait applicable aux systèmes décrits par des Hamiltoniens PT symétriques mais pas forcément Hermitiens.

Notre contribution dans ces sujets se résume en trois travaux complémentaires. Le premier concerne la résolution de l'équation aux valeurs propres de Schrödinger pour une famille générale de potentiels centraux et singuliers à trois dimensions. Cette famille de potentiels, qui sont des combinaisons de termes de puissances positives et négatives de r , a été construite de telle sorte qu'elle généralise quelques potentiels connus dans la littérature. Il est bien connu, que pour ce type de potentiels, l'équation de Schrödinger ne peut pas être résolue exactement, et les différentes approches utilisées jusqu'à maintenant avaient conduit à la détermination des caractéristiques de l'état fondamental seul. Nous avons montré qu'avec la supersymétrie, il est possible de déterminer les caractéristiques d'un état quelconque. Dans certains cas particuliers, on peut déterminer les caractéristiques de l'état fondamental et de du premier état excité. La technique peut être généralisée pour donner les caractéristique d'un état arbitraire ou de deux états arbitraires dans certains cas. Notre perspective dans ce sujet est d'essayer de construire d'autres familles de potentiels non singuliers dont on peut déterminer plus de deux états.

Toujours dans le cadre de la supersymétrie, nous avons déformé les potentiels cités plus haut pour les rendre non Hermitiens mais PT symétriques. Nous avons déterminé les caractéristiques

de l'état fondamental dans le cas général et nous avons présenté des exemples illustratifs pour des cas particuliers intéressants. Là aussi, nous avons réussi à vérifier certains résultats connus dans la théorie générale des potentiels PT symétriques. En particulier, nous avons montré qu'effectivement certains états ont des normes négatives. Nous sommes arrivés à cette conclusion déjà dans un cadre général et ensuite nous l'avons prouvé par des exemples numériques dans certains cas particuliers. Nos perspectives pour ce sujet sont nombreuses mais la plus importante est d'essayer de voir dans le futur s'il est possible de déterminer l'opérateur C , caractérisant la symétrie cachée de conjugaison de charge, du moins de façon perturbative.

Le dernier travail présenté dans ce mémoire, concernant toujours la PT symétrie, consiste en la détermination des valeurs propres et fonctions propres d'Hamiltoniens PT symétriques représentés par des matrices complexes. Nous nous sommes limité à considérer deux Hamiltoniens relativement simples à trois et quatre niveaux d'énergies. Le but recherché ici était de présenter une méthode systématique de résolution de ce type de problèmes qui pourra être suivie pour résoudre des problèmes semblables mais plus complexes dans le futur. Nous avons obtenu certains résultats intéressants dont notamment la détermination de façon exacte de l'expression de l'opérateur de conjugaison de charge. Ceci a permis alors de construire une base de vecteurs d'états orthonormés comme il est exigé en mécanique quantique. Il reste cependant beaucoup de chemins à faire dans ce contexte.

Annexe A

Rappels sur les symétries discrètes en mécanique quantique

On entend par symétrie en physique une transformation qui laisse invariante une loi ou une grandeur physique observable. Par exemple, la loi de Newton en mécanique classique est invariante par rapport à la transformation de Gallilé; l'Hamiltonien d'une particule libre en mécanique quantique est invariant par translation, ... Ces symétries sont souvent associées à des lois de conservation de certaines grandeurs physiques. Ainsi, on dit qu'un système est invariant sous une certaine symétrie, si les prédictions des résultats demeurent inchangées après que l'on lui fait subir l'opération de symétrie en question. Par exemple, l'invariance par translation conduit à la conservation de l'impulsion totale et l'invariance par rotation donne la conservation du moment cinétique. Il est donc évident que cette notion de symétrie joue un rôle très important dans la prédiction des résultats observés et la classification des systèmes physiques.

Les symétries forment ce que les mathématiciens appellent des groupes, c'est pour cela que l'étude des symétries en physique est souvent appelée théorie des groupes (groupe de Lie), d'où la théorie des groupes est la théorie parfaite pour étudier les symétries.

En général, les symétries en physique sont partagées en deux catégories : les symétries qui sont indépendantes des coordonnées des particules et celles qui en dépendent. Dans la première catégorie, on peut citer à titre d'exemple les symétries internes (isospin, couleur), les symétries de cinématique relativiste (groupe de Lorentz et de Poincaré), les symétries globales (rotation,

translation), ... Les symétries de la seconde catégorie sont généralement appelées symétries locales. Certains dépendent continûment d'un ou de plusieurs paramètres (les translations spatiales et temporelles, les rotations, ..). Les symétries auxquelles nous allons nous intéresser sont celles qui sont globales et discrètes.

On dit que la symétrie est discrète lorsque les opérations de transformation autorisées constituent un ensemble fini. On connaît trois symétries discrètes : la parité, la conjugaison de charge et le renversement du temps.

En mécanique quantique, on associe à une transformation un opérateur K qui agit sur les observables et les vecteurs d'états. Son action sur un ket $|\Psi(t)\rangle$, qui représente le vecteur d'état d'un système physique, donne un nouveau ket, c'est-à-dire un nouvel état physique $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$.

$$|\tilde{\Psi}(t)\rangle = K |\Psi(t)\rangle. \quad (\text{A.1})$$

En général, les transformations en physique sont inversibles, ce qui permet de définir l'opérateur inverse de K , dénoté K^{-1} tel que

$$|\Psi(t)\rangle = K^{-1} |\tilde{\Psi}(t)\rangle, \quad (\text{A.2})$$

avec évidemment

$$KK^{-1} = 1. \quad (\text{A.3})$$

Partons de l'équation de Schrödinger dépendant du temps en représentation de Dirac

$$i \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (\text{A.4})$$

et appliquons l'opérateur K à gauche sur les deux membres. Si K est indépendant du temps et linéaire, l'évolution dans le temps du ket $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$ est donnée, compte tenu de (A.1) et (A.2), par

$$i \frac{d}{dt} |\tilde{\Psi}(t)\rangle = \tilde{H} |\tilde{\Psi}(t)\rangle, \quad (\text{A.5})$$

avec

$$\tilde{H} = KHK^{-1}. \quad (\text{A.6})$$

Cette dernière relation est en fait équivalent à dire que la moyenne de H dans un état quelconque $|\Psi(t)\rangle$ est la même que la moyenne de \tilde{H} dans l'état transformé $|\tilde{\Psi}(t)\rangle$. Cette définition est en général généralisée pour toute observable représentée par un opérateur A . En particulier les transformées des opérateurs position \mathbf{r} et impulsion \mathbf{p} vis-à-vis de la transformation représentée par K , seront définies par

$$\tilde{\mathbf{r}} = K\mathbf{r}K^{-1}, \quad (\text{A.7})$$

et

$$\tilde{\mathbf{p}} = K\mathbf{p}K^{-1}, \quad (\text{A.8})$$

à partir desquels, on peut obtenir la transformée de n'importe quel opérateur.

Si $\tilde{H} = H$, c'est-à-dire si K commute avec H , on dit que l'opérateur K représente une opération de symétrie

$$[H, K] = 0. \quad (\text{A.9})$$

Dans ce cas les états propres de H sont aussi états propres de K .

A.0.8 Parité en mécanique quantique

La parité est une opération de transformation symétrique du système physique qui correspond en général à la symétrie par rapport un point, qui généralement coïncident avec l'origine du repère des coordonnées. Elle est communément désignée par un opérateur linéaire, dénoté P . Cette notion a été introduite pour la première fois en 1927 par Wigner [29]. Parfois, elle est appelée inversion de l'espace ou encore transformation miroir. Le rôle de cette transformation sur une équation de la physique est donc de renverser le signe des coordonnées spatiales de l'espace. Ainsi

$$P \equiv \begin{cases} \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r} \\ \mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p} \text{ où } \mathbf{p} = -i\frac{d}{d\mathbf{r}} = -i\nabla \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

L'action de P sur le vecteur d'état $|\Psi\rangle$ d'un système physique le transforme en un autre vecteur d'état $|\tilde{\Psi}\rangle$:

$$P|\Psi\rangle = |\tilde{\Psi}\rangle. \quad (\text{A.11})$$

L'équation adjointe s'écrit

$$\langle \tilde{\Psi} | = \langle \Psi | P^+, \quad (\text{A.12})$$

où P^+ est l'opérateur adjoint de \hat{P} .

Physiquement, l'inversion de l'espace doit être définie de telle sorte que $\Psi(\mathbf{r})$ est la fonction d'onde d'une particule, sa fonction après inversion de l'espace devrait être proportionnelle à $\Psi(-\mathbf{r})$. Ceci signifie alors qu'on devrait avoir

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}) = \alpha \Psi(-\mathbf{r}) \quad (\text{A.13})$$

où α est une constante. En inversion une autre fois l'espace, on aura

$$\tilde{\tilde{\Psi}}(\mathbf{r}) = \alpha \tilde{\Psi}(-\mathbf{r}) = \alpha^2 \Psi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.14})$$

Mais, puisque si on inverse deux fois de suite l'espace, on revient à la situation initiale de sorte que la fonction d'onde du système ne changera pas. Ainsi, on

$$\alpha^2 = 1 \Rightarrow \alpha = \pm 1, \quad (\text{A.15})$$

et

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{r}) = \pm \Psi(-\mathbf{r}). \quad (\text{A.16})$$

Maintenant, la norme de l'état $|\tilde{\Psi}\rangle$ est donnée par

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle &= \iiint_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{r}) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}) \\ &= \iiint_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r} \tilde{\Psi}^*(-\mathbf{r}) \tilde{\Psi}(-\mathbf{r}) \\ &= \iiint_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = \langle \Psi | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

où dans la dernière étape on a utilisé (A.16). Cette dernière relation exprime alors la conservation de la norme d'un état physique par inversion de l'espace. En utilisant la notation de

Dirac, cette propriété s'écrit

$$\begin{aligned}\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle &= \langle \Psi | P^+ P | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | \Psi \rangle\end{aligned}$$

ce qui entraîne une propriété fondamentale de l'opérateur P , qui est l'unitarité.

$$P^+ P = 1. \tag{A.18}$$

Par ailleurs, dans la notation de Dirac, on peut écrire la relation (A.16) sous la forme

$$\langle \mathbf{r} | \tilde{\Psi} \rangle = \pm \langle -\mathbf{r} | \Psi \rangle,$$

qui doit être valide pour tout vecteur d'état $|\Psi\rangle$, et par conséquent on obtient l'action de P sur le vecteur position $|\mathbf{r}\rangle$ comme

$$P |\mathbf{r}\rangle = \pm |-\mathbf{r}\rangle. \tag{A.19}$$

De cette dernière relation, il découle que

$$P^2 = I, \tag{A.20}$$

où I est l'opérateur identité.

En comparant (A.18) et (A.20), on en déduit que :

$$P = P^+ = P^{-1}. \tag{A.21}$$

Action de P sur l'opérateur \hat{r}

D'après la relation (A.7), on a

$$\begin{aligned}\tilde{\hat{r}} &= P\hat{r}P \\ &= \int \int dr' dr'' |r'\rangle \langle r'| P\hat{r}P |r''\rangle \langle r''| \\ &= \int \int dr' dr'' |r'\rangle \langle -r'| \hat{r} | -r''\rangle \langle r''| \\ &= - \int \int dr' dr'' r' \delta(r' - r'') |r'\rangle \langle r''| \\ &= - \int dr' r' |r'\rangle \langle r'|, \end{aligned} \tag{A.22}$$

et par conséquent

$$P\hat{r}P = -\hat{r}. \tag{A.23}$$

Action de P sur l'opérateur \hat{p}

Puisque \hat{p} peut être représenté dans la représentation $|r\rangle$ par $-i\frac{d}{dr}$, on peut montrer par un calcul similaire que

$$P\hat{p}P = -\hat{p}. \tag{A.24}$$

A.0.9 Renversement du temps en mécanique quantique

Le renversement du temps est une transformation symétrique discrète du système physique, qui est communément désignée par l'opérateur T , appelée également opérateur de conjugaison complexe en mécanique quantique.

Cet opérateur consiste à renverser le signe de la coordonnée temporelle (t) en $(-t)$. Par l'action de cet opérateur sur l'espace des états, la coordonnée de position r reste inchangée de l'impulsion \mathbf{p} est renversé. Ceci s'explique physiquement par le fait que $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ pour une particule libre classique et dans ce cas le renversement du temps change \mathbf{v} en $-\mathbf{v}$. Ainsi, contrairement à l'opérateur P , l'opérateur de renversement du temps T ne s'applique pas de la même manière sur r et \mathbf{p} .

Pour déterminer l'action de T sur une fonction d'onde en mécanique quantique, on doit imposer à ce que la fonction d'onde après renversement du temps doit être proportionnelle à la

fonction d'onde initiale dans laquelle on a changé t en $-t$. Pour une particule libre d'impulsion \mathbf{p} , la fonction d'onde est donnée par une onde plane $\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + Et)}$. Si le temps est renversé, on doit remplacer t par $-t$ et \mathbf{p} par $-\mathbf{p}$, ce qui donne $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) = e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} + Et)}$. On constate alors que la double opération $t \rightarrow -t$ et $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ est équivalente à remplacer $\Psi(\mathbf{r}, t)$ par son complexe conjugué; $\Psi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \Psi^*(\mathbf{r}, t)$. Ce résultat, qui est donc évident pour une particule libre peut être généralisé à une particule soumise à une interaction quelconque. Pour cela, nous devons partir de la définition de l'action de T sur $\hat{\mathbf{r}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$.

Action de T sur l'opérateur $\hat{\mathbf{r}}$

En suivant la définition (A.7), on peut écrire

$$\tilde{\hat{\mathbf{r}}} = T\hat{\mathbf{r}}T^{-1} = \hat{\mathbf{r}}. \quad (\text{A.25})$$

Action de T sur l'opérateur $\hat{\mathbf{p}}$

De la même manière on obtient

$$\tilde{\hat{\mathbf{p}}} = T\hat{\mathbf{p}}T^{-1} = -\hat{\mathbf{p}}. \quad (\text{A.26})$$

Il découle immédiatement de ces définitions que

$$T^2 = 1. \quad (\text{A.27})$$

Action de T sur une fonction d'onde

En prenant la moyenne sur un état $|\Psi\rangle$ des deux membres de chacune des relations (A.25) et (A.26), on peut écrire,

$$\int d\mathbf{r} \mathbf{r} \Psi^*(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r} \mathbf{r} \tilde{\Psi}^*(\mathbf{r}, t) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.28})$$

et

$$\begin{aligned}
 - \int dr \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left(-i \frac{d}{dr} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int dr \tilde{\Psi}^*(\mathbf{r}, t) \left(-i \frac{d}{dr} \right) \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\
 &= - \int dr \tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) \left(-i \frac{d}{dr} \right) \tilde{\Psi}^*(\mathbf{r}, t), \quad (\text{A.29})
 \end{aligned}$$

où dans la deuxième étape, on a effectué une intégration par partie et utilisé le fait que $\tilde{\Psi}(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$ si $\mathbf{r} \rightarrow \pm\infty$. Il est donc clair qu'il est naturel de définir $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ par

$$\Psi^*(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | T | \Psi(t) \rangle, \quad (\text{A.30})$$

et

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi(t) | T^{-1} | \mathbf{r} \rangle. \quad (\text{A.31})$$

En prenant le complexe conjugué des deux membres de (A.30), on obtient

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | T | \Psi(t) \rangle^* = \langle \Psi(t) | T^+ | \mathbf{r} \rangle,$$

ce qui entraîne, en tenant compte de (A.27), que

$$T^+ = T^{-1}, \quad (\text{A.32})$$

cependant il n'est pas garanti que T est Hermitien. En effet, à partir de (A.30), il est aisé de voir que

$$T[\lambda |\Psi(t)\rangle] = \lambda^* T|\Psi(t)\rangle,$$

et donc T est antilinéaire et par conséquent d'après (A.32), il est antiunitaire.

Bibliographie

- [1] E. Schrödinger, Proc. Roy. Irish Acad. **46** A 9 (1940); E. Schrödinger, Proc.Roy. Irish Acad. **46** A 183 (1940); E. Schrödinger, Proc.Roy. Irish Acad. **47** A, 53 (1940).
- [2] L. Infeld et T. E.Hull.Rev.Mod Phys 23(1951)21 ;L.Infeld, Phys Rev 59(1941)737 ; L. Infeld et T. E. Hull. Phys. Rev. **74** , 1497 (1948).
- [3] F. Cooper, A. Khare et U. Sukhatme, Phys. Rep. **251**, 267 (1995); F. cooper, A.Khare, U.Sukhatme, Supersymmetry in Quantum Mechanics (Singapore : World Scientific); F. Cooper, A. Khare et U. Sukhatmi, arXiv, hep-th/9405029.
- [4] L .Gendenshtein, JETP, Lett **38**, 356 (1983).
- [5] C. M. Bender and S. Boettcher, Phys. Rev. Lett. **80**, 5243 (1998); M. Znojil, J. Phys. A **36**, 7639 (2003).
- [6] C. M. Bender and S. Boettcher, and V. M. Savage, J. Math. Phys. (N.Y) **41**, 6381 (2000); C. M.Bender and Q.Wang, J. Phys. A **34**, 3325 (2001).
- [7] C. M. Bender and S. Boettcher, P. N. Meisinger and Q. Wang, Phys. Lett. A **202**, 286 (2002).
- [8] C. M. Bender, Dorje C. Brody, and Hugh F. Jones; Phy. Rev. Lett. **89**. 270401 (2002).
- [9] C. M. Bender, D. C. Brody and H. F. Jones, Am. J. Phys. **71**, 1905 (2003); C. M. Bender and H. F. Jones, Phys. Lett. A **328**, 102 (2004).
- [10] H. Nicolai, J. Phys, A : Math, Gen. **9**,1497 (1976).
- [11] E. Witten, Nucl.phys. B **188** (1981) 513 ; E. Witten, Nucl. Phys. B **202**, 253 1982); E.Witten, J.differ. Geom.**17**, 661 (1982).

- [12] A. Gangopadhyaya, J. V. Mallow, C. Rasinariu and U. Sukhatme : Chin. Jour. Phys. **39**, N. 2 (2001).
- [13] G. Junker, *Supersymmetry Methods in Quantum and Statistical Physics*, Berlin, Springer (1996); C. V. Sukumar, *Supersymmetric quantum mechanics and its applications* (Wadham College, University of Oxford, Oxford OX1 3PN, England).
- [14] J. Szczesny, Fortschr. Phys. **49**, 723 (2001).
- [15] G. A. Mezincescu, J. Phys. A **33**, 4911 (2000).
- [16] D. T. Barclay, R. Dutt, A. Gangopadhyaya, A. Khare, A. Pagnamenta et U. Sukhatme, Phys. Rev. A **48**, 2786 (1993).
- [17] P. Dorey, C. Dunning, and R. Tateo, J. Phys. A **34**, L391 (2001); *ibid* **34**, 5679 (2001)
- [18] A. Mostafazadeh, J. Math. Phys. **43**, 2005 (2002); A. Mostafazaddeh, J. Math. Phys., **43**, 2814 (2002); A. Mostafazadeh, J. Phys. A **36**, 1125 (2003).
- [19] S. Weigert, Phys. Rev. A **68**, 062111 (2003); A. Mostafazadeh, Czech. J. Phys. A **37**, 11645 (2004).
- [20] A. Mostafazadeh, J. Phys. A **38**, 3213 (2005); A. Mostafazadeh, J. Math. Phys. **46**, 102108 (2005).
- [21] Q. Wang, Calculation of C Operator in PT -Symmetric Quantum Mechanics. 2004, Vol. 50, Part 2, 986–992, A. Zafer, Phys. Lett. A **310**, 139 (2003).
- [22] S. Boudoukha, mémoire de Magister, Supersymétrie en Mécanique Quantique : Etude de quelques potentiels singuliers, Université Ferhat Abbas- Sétif, 2005.
- [23] R. S. Kaushal, Ann. Phys., NY **206**, 90 (1991); R. S. Kaushal Phys. Lett A **142**, 57 (1989).
- [24] Y. P. Varshni, Phys. Lett. A **183**, 9 (1993).
- [25] L. Chetouani, A. Chouchaoui and T. F. Hammann, Fortschr. Phys. **41**, 209 (1993).
- [26] B. Chakrabarti and T. Kumar. Das, J. Phys. A : Math. Gen. **35**, 4 701 (2002).
- [27] T. V. Fityo, arXiv : quant-ph/0204029.
- [28] C. M. Bender, M. V. Berry and A. Mandilara.
- [29] J. Collot, Cours de physique des particules du master recherche de physique subatomique et d'astroparticule (UJF Grenoble / U. de Savoie) Année : 2005-2006.

- [30] A. Mostafazadeh, Pseudo-Hermiticity versus PT Symmetry : The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian, arXiv : math-ph/0107001 ; A. Mostafazadeh, Phys. Lett. B **650**, 208 (2007).

Résumé

Nous avons présenté dans ce mémoire quelques travaux concernant des sujets d'actualité en théorie quantique non relativiste qui représentent par trois travaux originels.

Le premier travail, nous avons fait une étude de famille de potentiels singuliers, $v^{(p)}(r) = cr^{-2p} + br^{-p-1} + dr^{-2} + gr^{-p+1} + ar^2 + er^{p+1} + fr^{2p} + kr^{p-1}$ en utilisant la méthode supersymétrie en mécanique quantique pour résoudre partiellement le problème de l'équations aux valeurs propres de cette famille pour $p > 1$ et $p < 1$. Nous avons obtenue deux niveaux énergétiques et des fonctions d'ondes correspondants, selon les contraintes sur les paramètres a,b,c,d,e,f,g,k, et ensuite nous avons pu déterminé et illustré les fonctions d'ondes qui choisissent les valeurs réelle des ces paramètres.

Le second travail, nous avons rétablie une étude de la famille des potentiels précédentes dans le cadre de la symétrie PT (la symétrie de l'inverse de l'espace et renversement du temps) avec les paramètres complexes, pour obtenir les spectres énergétiques positives et les fonctions propres correspondantes.

Enfin, nous avons fait une étude deux système ayant trois et quatre niveaux représentées par deux Hamiltoniens PT symétriques et non hermitiennes pour obtenir les spectres énergétiques et les états propres correspondantes. Parmi ces états propre, il y a les états singuliers qui ont des normes négatives et pour éliminer ces normes négatives, nous avons fait engendré la symétrie cachée C depuis les Hamiltoniens précédentes. Ainsi, nous avons obtenu la positivité des normes précédentes.

Mots clef: supersymétrie, Hamiltonien Hermitien, invariance de forme, non Hermitien, la symétrie PT, la symétrie caché C, opérateur CPT.