

QUELQUES ASPECTS DE LA DIFFUSION QUANTIQUE: TEMPS DE RETARD, THÉORÈME DE LEVINSON ET POTENTIELS DÉPENDANT DU TEMPS

THÈSE N° 1438 (1995)

PRÉSENTÉE AU DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE FÉDÉRALE DE LAUSANNE

POUR L'OBTENTION DU GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES

PAR

Massimiliano SASSOLI DE BIANCHI

Physicien diplômé de l'Université de Lausanne
de nationalité italienne

acceptée sur proposition du jury:

Prof. Ph.-A. Martin, directeur de thèse
Prof. W. Amrein, corapporteur
Dr K. Maschke, corapporteur
Prof. D. Yafaev, corapporteur

Lausanne, EPFL
1995

A Gaby, Federico e Luca

Résumé

Dans cette thèse on aborde divers aspects de la diffusion par potentiel en mécanique quantique non-relativiste.

Dans la première partie, nous étudions le concept de temps de retard. Plus précisément, après une introduction élémentaire à la théorie (chapitre I), nous clarifions au chapitre II le rôle joué par les régions de localisation dans la définition du temps de retard global. Au chapitre III, nous généralisons le concept à des conditions d'observation arbitraires pour la particule diffusée (temps de retard conditionnel). Aux chapitres IV et V, nous abordons le problème de la mesure du temps de retard par des horloges physiques et, plus particulièrement, par l'horloge de Larmor qui exploite le mécanisme de précession d'un spin dans un champ magnétique.

Dans la deuxième partie nous nous intéressons à la propriété spectrale du temps de retard, à son lien avec le théorème de Levinson, et à l'application de ce dernier à des systèmes unidimensionnels. Nous dérivons le théorème de Levinson au chapitre VI, en utilisant comme seul ingrédient la complétude des états physiques. Au chapitre VII, nous appliquons le résultat de Levinson pour déterminer le nombre d'états liés d'un potentiel périodique fini, en fonction de sa période. Pour cela, nous utilisons la propriété de factorisation de la matrice de diffusion que nous dérivons au chapitre VIII dans le cadre plus général d'une particule avec masse dépendante de la position.

Dans la troisième partie, nous sommes concernés par les potentiels dépendant du temps. Au chapitre IX, nous généralisons le concept de temps de retard, et pour le cas particulier d'une variation périodique nous dérivons un théorème de Levinson. Au chapitre X, nous considérons des potentiels qui varient très lentement ou très rapidement au cours du temps. Les limites basse et haute fréquence sont dérivées ainsi que les premières corrections, et leur interprétation physique est discutée.

Abstract

In this Thesis we study several aspects of potential scattering in non-relativistic quantum mechanics.

In the first part, we study the concept of time delay. More precisely, after an elementary introduction to the theory (chapter I), we clarify in chapter II the role played by the localizing regions in the definition of global time delay. In chapter III, we generalize the concept to arbitrary conditions of observation for the scattered particle (conditional time delay). In chapters IV and V, we address the problem of the measure of time delay by physical clocks and, more specifically, by the Larmor clock which exploits the mechanism of precession of a spin in a magnetic field.

In the second part, we are interested in the spectral property of time delay, its connection with Levinson's theorem, and the application of the latter to one-dimensional systems. We derive Levinson's theorem in chapter VI, using as a single ingredient the completeness of physical states. In chapter VII, we apply Levinson's result to determine the number of bound-states of a finite periodic potential, as a function of its period. For this, we use the factorization property of the scattering matrix which we derive in chapter VIII in the more general situation of a particle with position-dependent mass.

In the third part, we are concerned by time-dependent potentials. In chapter IX, we generalize the concept of time delay, and for the particular case of a periodic variation we derive a Levinson theorem. In chapter X, we consider potentials with very slow or very rapid variations in time. The low and high frequency limits are derived as well as their first corrections, and their physical significance discussed.

Avant-propos

Cette thèse voit le jour, un peu par hasard, à la suite d'un séminaire du Prof. J. P. Marchand sur le sujet controversé de la durée de l'effet tunnel. Le problème n'était pas sans liens avec la théorie du temps de retard qui avait connu ses débuts brillants à Genève sous la direction du Prof. J. M. Jauch. Ce fût là l'occasion pour mon directeur de thèse, qui est un ancien élève de Jauch, de renouer avec son premier sujet de recherche, et pour moi d'apprendre les rudiments de la théorie quantique de la diffusion. Cela a donné lieu à une suite assez nombreuse et variée de travaux, qui parfois ont pris des directions assez imprévisibles, et qui ont fini par constituer le treillis un peu irrégulier de cette thèse.

La matière est organisée en trois parties distinctes, une pour chaque mot clé qui apparaît dans le titre. Chaque partie comporte un certain nombre de chapitres. À l'exception du premier, qui se présente comme une introduction élémentaire à la théorie du temps de retard, chaque chapitre comprend (essentiellement) un article en anglais, précédé par une introduction en français qui en résume les idées principales. Cela donne au texte un aspect quelque peu modulaire et une certaine coloration internationale. Cette manière de faire présente cependant deux avantages. Le premier est pour l'auteur, qui évite la tâche pénible et un peu artificielle de la réécriture des neuf articles qui constituent le coeur dur de cette thèse. Le deuxième est pour le lecteur, qui garde ainsi la possibilité de parcourir le texte en suivant des clés de lecture différentes. Il pourra par exemple se faire une idée assez précise de son contenu en ne lisant que les parties en français, ou alors aller droit au but en passant directement aux articles qui le concernent de plus près. Aussi, les parties en français étant écrites avec un style plus formel, utilisant surtout la notation du physicien, elles s'adressent à un public plus large de lecteurs, qui n'est pas forcément habitué à un symbolisme par trop mathématique. À ce sujet, il faudrait encore ajouter que cette thèse se situe quelque part à mi-chemin entre un travail de physique théorique, au sens le plus large du terme, et un travail de physique mathématique. En effet, même si parfois nous effectuons des preuves rigoureuses, l'accent est toujours mis sur les motivations physiques et l'interprétation des résultats. Un dernier avertissement concernant la notation. Si elle peut changer suivant les articles, une seule notation a été utilisée pour toute la partie du texte qui est écrite en français.

J'aimerais pour finir exprimer les remerciements les plus sincères à mon directeur de thèse, le Prof. Ph. A. Martin, pour sa compétence, son honnêteté intellectuelle et son amitié, qui ont été pour moi d'un grand secours tout au long de ces années. Par son intérêt pour mon travail et la confiance qu'il m'a toujours témoignée, il a su diriger cette thèse comme une vraie collaboration scientifique, tout en permettant à mon besoin d'indépendance de s'exprimer. Il m'a aussi transmis une image très positive du monde de la recherche qui est certainement pour beaucoup dans le plaisir que j'ai eu à effectuer ce travail. Mes remerciements vont aussi à M. Di Ventura, pour les échanges fructueux que nous avons eu ensemble, et aux corapporteurs de cette thèse qui ont accepté de la juger. J'ai le plaisir également de remercier tous les membres de l'Institut de Physique Théorique, pour le climat formidable et très enrichissant qui a toujours régné, ainsi que pour leur amitié.

Table des matières

Première partie	1
I. Une introduction élémentaire aux concepts de temps de séjour et temps de retard en théorie quantique de la diffusion	3
1. Introduction	3
2. Observable temps d'arrivé en mécanique quantique	4
3. Le concept de temps de séjour	7
4. Compatibilité et interférences	11
5. Temps de retard	13
6. Le temps de retard et sa limite	18
7. Heuristique classique du temps de retard quantique	20
II. Le rôle des régions dans la définition du temps de retard	23
1. Introduction	23
2. Article	25
III. Temps de séjour et temps de retard conditionnels	35
1. Introduction	35
2. Article	38
IV. Les horloges physiques	57
1. Introduction	57
2. Article	62
V. Précession - versus - effet Stern-Gerlach	87
1. Introduction	87
2. Article	88

Deuxième partie	97
VI. De la propriété spectrale du temps de retard au théorème de Levinson	99
1. Introduction	99
2. Article	103
VII. Quel est le nombre d'états liés d'un potentiel périodique fini?	121
1. Introduction	121
2. Article	124
VIII. Sur la propriété de factorisation de la matrice de diffusion pour une particule avec masse dépendante de la position	139
1. Introduction	139
2. Article	140
Troisième partie	149
IX. Temps de retard et théorème de Levinson pour des potentiels dépendant du temps	153
1. Introduction	153
2. Temps de retard pour potentiels dépendant du temps	157
3. Propriété spectrale du temps de retard et théorème de Levinson	162
4. Article	166
5. Complément à l'article	173
6. Série de Born et comportement à haute et basse énergie	177
X. Théorème adiabatique et théorème "haute fréquence" en théorie quantique de la diffusion	183
1. Introduction	183
2. Article	187
Conclusion et commentaires	215
Références	219
Curriculum Vitae	221

Première partie

Si l'on compare le mouvement d'une particule interagissant avec un potentiel (ou une autre particule) avec le mouvement d'une même particule ne subissant pas l'effet de ce dernier, on remarquera essentiellement deux types de changements: une déviation spatiale et un retard temporel. C'est de ce dernier changement que nous allons nous occuper dans cette première partie qui est organisée comme suit. Au chapitre I, nous présentons une introduction élémentaire aux concepts de temps de séjour et de retard en mécanique quantique. Au chapitre II, nous analysons le rôle joué par les régions de localisation dans la définition du temps de retard. Le chapitre III est consacré à l'étude du concept de temps de retard conditionnel. Dans le IVème, nous nous penchons sur le problème de la mesure du temps de retard par des horloges physiques et enfin, dans le Vème, nous utilisons le concept de temps de séjour pour élucider le mécanisme de précession d'un spin traversant une région de champ magnétique.

I. Une introduction élémentaire aux concepts de temps de séjour et temps de retard en théorie quantique de la diffusion

1. Introduction

Tout comme la position ou la vitesse, le retard, ou temps de retard, fait partie de ces concepts classiques qui sont familiers à tout un chacun. Tout le monde s'accorde par exemple pour dire qu'on est en retard quand on n'arrive pas à l'heure. Plus précisément, cela sous entend une mesure d'un temps d'arrivée, à un endroit donné de l'espace, et sa comparaison avec un temps de référence qui, par définition, est supposé correspondre à une situation de retard (ou d'avance) zéro. Le temps de retard est donc une quantité relative. Elle est aussi quantitativement quelque peu arbitraire, en raison des choix différents, à priori possibles, pour un temps de référence.

En physique on peut associer un temps de retard au mouvement d'une particule qui se meut en présence d'un potentiel. Le retard (ou l'avance) caractérise alors, en quelque sorte, l'excès de temps passé par la particule dans la région d'interaction, lorsque son mouvement est comparé à celui d'une particule libre soumise aux mêmes conditions initiales. Il va sans dire que la connaissance du temps de retard nous informe sur la nature de l'interaction. Un temps de retard infini correspond, par exemple, à un phénomène de capture, un temps de retard grand positif à la formation d'un état quasi-lié de longue durée de vie (résonance), un temps de retard négatif à un effet d'accélération.

Historiquement, c'est à Eisenbud et Wigner qui revient l'idée d'associer en mécanique quantique un temps de retard à un processus de diffusion [E],[Wi]. Par leur célèbre formule, ils relient ce dernier, dans le cadre de la diffusion d'une onde partielle par un potentiel central, à la dérivée par rapport à l'énergie du déphasage. Par la suite, le concept de temps de retard a reçu une formulation dépendante du temps s'inscrivant dans le cadre hilbertien de la diffusion quantique développé par Jauch en 1958 [Jau1]. Cette nouvelle formulation, qui a l'avantage d'être mathématiquement plus précise mais

aussi physiquement beaucoup plus transparente, utilise la notion de temps de séjour i.e., le temps moyen passé par la particule, tout au long de son évolution, dans une région bornée de l'espace. Le temps de retard est alors défini comme la différence entre les temps de séjour total et libre, dans la limite où cette région recouvre l'espace physique tout entier (voir par exemple l'article de revue [Ma1]).

Ce chapitre est organisée comme suit. Dans la deuxième section, nous évoquons la difficulté bien connue concernant la définition d'une observable temps d'arrivée en mécanique quantique. Dans la troisième, nous montrons que cette difficulté ne s'applique pas au concept de temps de séjour que nous analyserons dans les détails dans un exemple élémentaire, celui de la particule libre unidimensionnelle. Dans la section 4, nous discutons du phénomène (purent quantique) d'interférence, et nous montrons comment il apparaît au niveau du temps de séjour. Dans la section 5, après un bref rappel de la théorie de la diffusion, nous définissons le temps de retard et dérivons la formule d'Eisenbud-Wigner. Nous évoquons certains problèmes mathématiques liés à l'existence de sa limite dans la section 6, et, dans la 7, nous en proposons une autre interprétation.

2. Observable temps d'arrivée en mécanique quantique

Il est bien connu que pour deux opérateurs autoadjoints A et B (i.e., deux observables), on a l'inégalité (voir un bon livre de mécanique quantique)

$$(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [A, B] \psi \rangle|, \quad (2.1)$$

avec $(\Delta A)_\psi = (\langle \psi | A^2 \psi \rangle - \langle \psi | A \psi \rangle^2)^{1/2}$ qui est l'écart quadratique moyen de l'observable A dans l'état ψ . Le second membre de (2.1) dépend en général de ψ . Il y a exception si le commutateur $[A, B]$ est, à un facteur près, l'opérateur identité I . C'est le cas par exemple pour la position $q = (q_1, \dots, q_d)$ et la quantité de mouvement $p = (p_1, \dots, p_d)$, qui satisfont aux relations de commutation de Heisenberg (d est ici la dimension de l'espace physique)

$$[q_i, p_j] = i\hbar \delta_{i,j} I, \quad i, j = 1, \dots, d. \quad (2.2)$$

Si on combine (2.1) avec (2.2), on arrive aux relations d'incertitude

$$(\Delta q_j)_\psi (\Delta p_j)_\psi \geq \hbar/2, \quad j = 1, \dots, d, \quad (2.3)$$

dont l'interprétation est la suivante: il n'existe aucun état ψ tel que les écarts quadratiques de la position et de la quantité de mouvement soient aussi petits que l'on veut, car plus on essaye d'obtenir une valeur précise pour la position q_j , en variant ψ , et moins p_j peut être précisée. En d'autres mots, une particule ne peut pas être simultanément localisée dans la position et dans la quantité de mouvement avec une précision meilleure que celle donnée par (2.3).

D'autre part, pour une particule libre (pour simplifier, à une dimension d'espace) on peut associer à l'écart Δp en quantité de mouvement (pour un ψ donné), un écart en énergie $\Delta E = (dE/dp)\Delta p = v \Delta p$, avec $v = p/m$ qui est la vitesse de groupe du paquet d'ondes. Si Δq est l'extension spatiale du paquet, le temps Δt mis par ce dernier pour traverser un point de l'espace vaut, approximativement, $\Delta t \simeq \Delta q/v$. On en déduit que

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar/2. \quad (2.4)$$

Tout comme (2.3) est à comprendre à temps fixé, la relation (2.4) est à comprendre à position fixée: pour un paquet d'ondes avec largeur en énergie ΔE , évoluant librement, on est incapables de dire quand il traversera un point donné de l'espace (ou une surface à plus qu'une dimension) avec une précision meilleure que $\Delta t \simeq \hbar/\Delta E$.

La relation d'incertitude (2.4) est cependant à prendre avec précaution. En effet, elle laisse entendre qu'il existerait en mécanique quantique un concept bien défini de temps d'arrivée d'une particule en un point donné de l'espace. Nous allons voir que ce n'est pas le cas. Pour cela, nous commençons par remarquer que la dynamique d'une particule classique libre est décrite par les équations de Hamilton

$$\begin{aligned} \partial_t p &= -\partial_q H_0 = 0, \\ \partial_t q &= \partial_p H_0 = \frac{p}{m}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Dans (2.5) le temps joue le rôle de variable de contrôle, et l'énergie $E = H_0 = p^2/2m$ est fonction des variables restantes (seulement p dans le cas libre). Si par contre on choisit la position q comme variable de contrôle, on peut exprimer l'impulsion $p = \Pi_0 = \sqrt{2mE}$ en fonction des variables restantes (on a supposé $d = 1$, pour simplifier la discussion, et que la particule vient de la gauche), et on a les équations du mouvement

$$\begin{aligned} \partial_q E &= -\partial_t \Pi_0 = 0, \\ \partial_q t &= \partial_E \Pi_0 = \frac{m}{p}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

qui sont bien équivalentes à (2.5). En particulier, la deuxième équation dans (2.6) donne, après intégration,

$$t(q') = \frac{m}{p}(q' - q), \quad (2.7)$$

et on obtient donc

$$t_0 = -\frac{mq}{p} \quad (2.8)$$

pour l'observable classique qui donne le temps d'arrivée de la particule à l'origine. L'observable quantique correspondante serait donc, si on applique la règle qui consiste

à symétriser tout produit d'observables incompatibles¹,

$$\begin{aligned} T_0 &= -\frac{m}{2} (p^{-1} q + q p^{-1}) \\ &= -\frac{1}{4} (H_0^{-1} p q + q p H_0^{-1}). \end{aligned} \quad (2.9)$$

A l'aide de (2.3) on obtient alors, formellement,

$$[H_0, T_0] = i\hbar I. \quad (2.10)$$

La relation de commutation (2.10) exprime sous forme différentielle l'équation

$$T_0(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} T_0 e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} = T_0 - t, \quad (2.11)$$

qui correspond bien à la forme attendue pour l'évolution d'une observable temps en représentation de Heisenberg. Mais, justement, l'opérateur T_0 n'est pas une observable: il est bien symétrique mais pas autoadjoint². Une manière simple de le voir est de remarquer que comme T_0 satisfait formellement à la relation (2.10) de commutation canonique avec l'hamiltonien libre H_0 , s'il était autoadjoint alors $e^{i\alpha T_0}$ serait une représentation unitaire du groupe des translations en énergie. Comme on peut translater à la fois à gauche et à droite, l'existence d'une telle représentation est en contradiction avec le fait que le spectre de H_0 est borné inférieurement (d'ailleurs, pour un hamiltonien H plus général, cela serait en contradiction avec l'existence même d'un spectre ponctuel de valeurs propres). Donc, T_0 n'est pas autoadjoint, H_0 n'a pas d'opérateur canoniquement conjugué et, bien entendu, il n'y a pas d'autres manières possibles pour construire une observable temps en mécanique quantique³.

¹ Cette règle n'est pas sans difficultés (paradoxe de Temple) [T].

² Rappelons qu'en physique on décrit un système par ses propriétés, et qu'en mécanique quantique les propriétés correspondent aux projecteurs dont la valeur moyenne sur l'état du système donne la probabilité à priori avec laquelle la propriété est vérifiée, et cela indépendamment des propriétés spécifiques de l'appareil de mesure utilisé. L'intérêt qu'il y a à considérer des opérateurs autoadjoints en connexion avec les observables résulte alors du théorème spectral qui permet de décomposer de manière *unique* l'opérateur à l'aide d'une mesure à valeurs projecteurs, et donc de relier la mesure de l'observable aux propriétés du système.

³ En d'autres mots, cela signifie qu'il n'y a pas en mécanique quantique de concept idéal de temps d'arrivée, dans le sens d'une probabilité à priori correspondant à une mesure idéale qui ne fasse pas référence aux propriétés spécifiques de l'appareil de mesure. On peut cependant construire des observables temps d'arrivée plus générales, si on les comprend au sens plus large de mesures à valeurs opérateurs positifs, mais dans ce cas elles ne seront

3. Le concept de temps de séjour

Nous venons de voir que la relation d'incertitude temps-énergie (2.4) pouvait se comprendre, pour une particule libre, en interchangeant les rôles de p et q avec ceux de E et t , sans oublier d'effectuer le même changement dans les commentaires d'interprétation (i.e., remplacer "simultanément" par "au même point"). Nous avons vu aussi qu'une telle interprétation n'était que heuristique, faute d'une observable canoniquement conjuguée à l'énergie. On serait alors tentés de conclure que le temps n'a pas de place en mécanique quantique, en tant que variable dynamique. Il est en effet naturel de penser que sans un concept de temps d'arrivée il faut renoncer aussi à des concepts qui lui sont classiquement reliés, tel que, par exemple, celui de temps de séjour qui devrait en principe correspondre à une suite de mesures reproductibles de temps d'arrivée. Heureusement, il en va autrement. Pour voir cela, rappelons d'abord quelques faits importants du formalisme quantique.

En mécanique quantique on associe à un système physique un espace de Hilbert \mathcal{H} , l'espace des états. Un état est entièrement défini par la donnée d'un vecteur ψ dans \mathcal{H} , normalisé à 1, et définissant les propriétés actuelles du système. Ces propriétés a, b, \dots , correspondent à des projecteurs P_a, P_b, \dots , dans \mathcal{H} . La probabilité avec laquelle la propriété a est vérifiée est alors donnée par la valeur moyenne de P_a dans l'état ψ ,

$$\mathcal{P}_\psi(a) = \langle \psi | P_a \psi \rangle. \quad (3.1)$$

Plus précisément, si on fait subir au système une mesure qui correspond au test de la propriété a , on obtiendra une réponse affirmative avec une probabilité donnée par (3.1). De plus, a devient actuelle au moment correspondant à la fin de la mesure i.e., l'état du système est décrit par le vecteur $P_a \psi$, immédiatement après la mesure (réduction du paquet d'ondes).

Pour une particule non relativiste, sans spin, dans l'espace infini \mathbb{R}^d , de dimension $d \geq 1$, \mathcal{H} est l'ensemble des fonctions de carré sommable

$$\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d) = \left\{ \psi; \|\psi\|^2 = \int d^d x |\psi(x)|^2 < \infty \right\}, \quad (3.2)$$

avec le produit scalaire $\langle \psi | \psi' \rangle = \int d^d x \psi^*(x) \psi'(x)$. Soit, par exemple, b_r la propriété "la particule se trouve dans la boule spatiale $b_r = \{x \in \mathbb{R}^d; |x| \leq r\}$ ". Si la particule est dans pas définies de manière unique et vont dépendre de la description détaillée du compteur utilisé [A],[We],[KFT]. Une autre possibilité est celle de postuler l'existence d'intervalles de temps indivisibles (chronons) pour l'évolution d'un système. Il devient alors possible de démontrer l'existence d'un opérateur temps autoadjoint (l'usage de l'équation relativiste, qui permet aussi des énergies négatives, devient alors crucial), mais faute d'une vérification expérimentale de l'existence des chronons, l'hypothèse, bien que séduisante, reste spéculative [Mi],[AM].

l'état ψ , la probabilité avec laquelle on la trouve dans b_r vaut alors

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_\psi(b_r) &= \| P_r \psi \|^2 = \langle \psi | P_r \psi \rangle \\ &= \int_{b_r} d^d x |\psi(x)|^2,\end{aligned}\tag{3.3}$$

avec

$$P_r = \int_{b_r} d^d x |x\rangle\langle x|,\tag{3.4}$$

qui est le projecteur dans le sous-espace des états localisés dans la région b_r ⁴.

Lorsque le système évolue, certaines propriétés actuelles deviennent potentielles et, vice versa, certaines propriétés potentielles deviennent actuelles: l'état du système change au cours du temps. Plus précisément, soit ψ l'état du système au temps $t = 0$. Au temps t il vaut $\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi$, avec $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$ qui est l'opérateur unitaire d'évolution et H l'hamiltonien du système. Nous admettrons qu'il est de la forme $H = H_0 + V$, avec $H_0 = p^2/2m$ le terme d'énergie cinétique et V le potentiel qui sera de la forme

$$V = \int d^d x v(x) |x\rangle\langle x|,\tag{3.5}$$

avec $v(x)$ une fonction bornée de x qui va suffisamment vite à zéro quand $|x| \rightarrow \infty$ (potentiel local à courte portée).

En raison de ce qui précède, si ψ_t est l'état décrivant la particule au temps t , la probabilité de la trouver en ce même temps dans la région b_r vaut $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r)$. Il est donc naturel de définir le temps moyen passé par la particule dans la région b_r , tout au long de son évolution, par la moyenne

$$\begin{aligned}T_\psi(b_r) &= \int dt \mathcal{P}_{\psi_t}(b_r) \\ &= \int dt \int_{b_r} d^d x |\psi_t(x)|^2 \geq 0.\end{aligned}\tag{3.6}$$

Pour nous familiariser avec l'expression (3.6), considérons d'abord le cas d'une particule classique libre à une dimension ($d = 1$). On a alors l'équation du mouvement $x(t) = vt + x_0$, et la probabilité d'être dans l'intervalle $b_r = [-r, r]$ au temps t vaut

$$\mathcal{P}_t(b_r) = \int_{-r}^r dx \delta(x(t) - x).\tag{3.7}$$

Le temps passé par la particule dans b_r vaut donc

$$\begin{aligned}T(b_r) &= \int dt \mathcal{P}_t(b_r) \\ &= \frac{1}{v} \int_{-r}^r dx \int dt \delta\left(t - \frac{x - x_0}{v}\right) \\ &= \frac{2r}{v},\end{aligned}\tag{3.8}$$

⁴ Pour écrire (3.4) nous avons utilisé la notation formelle de Dirac, à l'aide des pseudo-vecteurs propres $q|x\rangle = x|x\rangle$, $x \in \mathbb{R}^d$, de l'opérateur position q , qui vérifient les relations de complétude $\int d^d x |x\rangle\langle x| = I$, et d'orthogonalité $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$.

ce qui correspond bien à la différence entre les temps $t(r) = (r - x_0)/v$ d'arrivée de la particule en r et $t(-r) = -(r + x_0)/v$ d'arrivée en $-r$.

Donc, classiquement, quand une notion de trajectoire est disponible, la définition (3.6) est équivalente à celle qu'on obtiendrait en définissant le temps de séjour comme la différence entre un temps de sortie et un temps d'entrée. Mais, quantiquement, quand une notion de trajectoire n'est plus disponible, la définition (3.6) est supérieure. En effet, sa validité conceptuelle est reliée à celle de la probabilité $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r)$. Comme cette dernière possède un sens précis en mécanique quantique, il en va de même pour la moyenne (3.6): en tant qu'énoncé purement probabiliste $T_\psi(b_r)$ est indépendant des détails de la théorie qui est sous-jacente à $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r)$, c'est à dire de l'existence ou non d'une notion de trajectoire.

Pour la particule libre quantique on a $\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\psi$ et (3.6) devient

$$T_\psi^0(b_r) = \langle \psi | T^0(b_r) \psi \rangle, \quad (3.9)$$

avec $T^0(b_r)$ qui est l'opérateur de temps de séjour libre

$$T^0(b_r) = \int dt e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}. \quad (3.10)$$

Contrairement à T_0 , l'opérateur $T^0(b_r)$ est autoadjoint [Jaw]. Il s'agit donc d'une observable. De plus,

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}H_0\tau} T^0(b_r) &= \int dt e^{\frac{i}{\hbar}H_0(t+\tau)} P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \\ &= \int dt e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(t-\tau)} \\ &= T^0(b_r) e^{\frac{i}{\hbar}H_0\tau}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

ce qui donne, en dérivant par rapport à τ ,

$$[T^0(b_r), H_0] = 0. \quad (3.12)$$

En d'autres termes, non seulement l'opérateur $T^0(b_r)$ est bien une observable mais, aussi, il n'entretient pas de relation d'incertitude avec l'énergie de la particule. Remarquons encore que le temps de séjour (3.6) est fini seulement si la probabilité $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r) = \int_{b_r} d^d x |\psi_t(x)|^2$ décroît suffisamment vite quand $t \rightarrow \pm\infty$. Si, par exemple, on choisit pour état au temps $t = 0$ un paquet d'ondes gaussien $\psi(k) = \langle k | \psi \rangle \sim e^{ikx_0} e^{-\sigma(k-k_0)^2}$, centré autour de la vitesse k_0/m , il est facile de montrer que la densité de probabilité $|\psi_t(x)|^2 = O(1/t^d)$, quand $t \rightarrow \pm\infty$. Il suit que $T_\psi^0(b_r)$ est fini pour $d \geq 2$ mais infini pour $d = 1$, et ceci pour tout choix de vitesse initiale k_0/m du paquet. Ceci s'explique par le phénomène d'étalement du paquet d'ondes qui, à son tour, est une manifestation des relations d'incertitude (2.3): contrairement au cas $d \geq 2$, à une seule dimension d'espace la dispersion du paquet d'ondes augmente au même taux linéaire en t que la distance parcourue.

En général, on montre que $T^0(b_r)$ est un opérateur borné pour $d \geq 2$. Il est non borné mais défini de manière dense dans $L^2(\mathbb{R})$ pour $d = 1$ (typiquement sur les états qui n'ont pas de composantes autour de l'énergie zéro) [L],[Jaw].

Nous terminons cette section par un calcul explicite de $T_\psi^0(b_r)$ dans le cas d'une particule libre unidimensionnelle. Pour cela, nous introduisons les pseudo-vecteurs propres simultanés de H_0 et de $\hat{p} = p/|p|$,

$$H_0|E, \hat{k}\rangle = E|E, \hat{k}\rangle, \quad \hat{p}|E, \hat{k}\rangle = \hbar\hat{k}|E, \hat{k}\rangle, \quad (3.13)$$

avec $E \in [0, \infty)$ et $\hat{k} \in S^{d-1}$ (la sphère unité). Ils vérifient les relations de complétude

$$\int_0^\infty dE \int_{S^{d-1}} d\hat{k} |E, \hat{k}\rangle \langle E, \hat{k}| = I, \quad (3.14)$$

et d'orthogonalité

$$\langle E, \hat{k}|E', \hat{k}'\rangle = \delta(E - E')\delta(\hat{k} - \hat{k}'), \quad (3.15)$$

et ont pour fonction d'onde

$$\langle x|E, \hat{k}\rangle = (2\pi\hbar)^{-d/2} \sqrt{m} (2mE)^{(d-2)/4} e^{i\sqrt{2mE}\hat{k}x}. \quad (3.16)$$

De manière générale, on notera $\psi(E) = \langle E|\psi\rangle$ les vecteurs dans $L^2(S^{d-1})$, et par

$$\langle \psi(E)|\psi'(E)\rangle_E = \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \psi^*(E, \hat{k})\psi'(E, \hat{k}), \quad \psi(E, \hat{k}) = \langle E, \hat{k}|\psi\rangle, \quad (3.17)$$

le produit scalaire correspondant. À une seule dimension d'espace, la sphère unité n'a que deux points $\hat{k} = \pm 1$, $\hat{p} = P_+^0 - P_-^0$, avec

$$P_\pm^0 = \int_0^\infty dE |E, \pm\rangle \langle E, \pm| \equiv |\pm\rangle \langle \pm| \quad (3.18)$$

qui sont les projecteurs dans les sous-espaces des états d'impulsion p positive (+), négative (-), respectivement. On a alors, pour une particule qui vient par exemple de la gauche i.e., $P_+^0\psi = \psi$,

$$\begin{aligned} T_\psi^0(b_r) &= \langle \psi|T^0(b_r)\psi\rangle \\ &= \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE' \psi^*(E, +)\langle E, +|T^0(b_r)|E', +\rangle\psi(E', +) \\ &= \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE' \psi^*(E, +)\langle E, +|P_r|E', +\rangle\psi(E', +) \int dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} \\ &= \int_0^\infty dE \langle +|T_E^0(b_r)|+\rangle |\psi(E, +)|^2, \end{aligned} \quad (3.19)$$

où pour la dernière égalité nous avons utilisé l'identité $\int dt e^{\frac{i}{\hbar}(E-E')t} = 2\pi\hbar\delta(E-E')$, et nous avons défini

$$\begin{aligned}
\langle +|T_E^0(b_r)|+ \rangle &= 2\pi\hbar\langle E, +|P_r|E, + \rangle \\
&= 2\pi\hbar \int_{-r}^r dx |\langle x|E, + \rangle|^2 \\
&= 2\pi\hbar \int_{-r}^r dx \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{m}{\hbar k}} e^{ikx} \right|^2 \\
&= \frac{2r}{v}, \quad v = \frac{\hbar k}{m} = \sqrt{\frac{2E}{m}}.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Enfin, (3.20) dans (3.19) donne pour le temps de séjour [en écrivant simplement $\psi(E)$ pour $\psi(E, +)$]

$$T_\psi^0(b_r) = \int_0^\infty dE \frac{2r}{v} |\psi(E)|^2. \tag{3.21}$$

Dans la limite $|\psi(E')|^2 \rightarrow \delta(E' - E)$ d'un paquet initial de mieux en mieux piqué autour de l'énergie E (limite monoénergétique), on retrouve le résultat classique (3.8). Bien entendu, on obtiendra le même résultat pour le cas d'une particule qui vient de la droite ($P_-^0\psi = \psi$).

4. Compatibilité et interférences

Deux propriétés a et b sont dites compatibles si les projecteurs associés P_a et P_b commutent i.e., $[P_a, P_b] = P_a P_b - P_b P_a = 0$. Si c'est le cas, une mesure de a immédiatement suivie d'une mesure de b est équivalente à une mesure de b immédiatement suivie d'une mesure de a , et peut donc être globalement interprétée comme une mesure de ab (i.e., a et b). En effet, si $[P_a, P_b] = 0$, $P_a P_b = P_b P_a$ est encore un projecteur, le projecteur associé à la propriété jointe ab . Plus précisément, si $\mathcal{P}_\psi(a) \neq 0$, la probabilité conditionnelle de b sachant a peut se définir de manière naturelle par

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}_\psi(b|a) &= \mathcal{P}_\psi(a \text{ et ensuite } b) / \mathcal{P}_\psi(a) \\
&= \mathcal{P}_{P_a\psi}(b) / \mathcal{P}_\psi(a) \\
&= \langle \psi | P_a P_b P_a \psi \rangle / \langle \psi | P_a \psi \rangle,
\end{aligned} \tag{4.1}$$

ou, de manière équivalente,

$$\mathcal{P}_\psi(b|a)\mathcal{P}_\psi(a) = \langle \psi | P_a P_b P_a \psi \rangle. \tag{4.2}$$

De même, si $\mathcal{P}_\psi(b) \neq 0$,

$$\mathcal{P}_\psi(a|b)\mathcal{P}_\psi(b) = \langle \psi | P_b P_a P_b \psi \rangle. \tag{4.3}$$

Les opérateurs $P_a P_b P_a$ et $P_b P_a P_b$ sont autoadjoints, positifs et a valeurs comprises entre 0 et 1. Cependant, quand $[P_a, P_b] \neq 0$, (4.2) = (4.3) si et seulement si $P_a P_b P_a = P_b P_a P_b$,

et on peut facilement montrer que cela revient précisément à demander que P_a et P_b commutent. Donc, si a et b sont incompatibles, le théorème classique de Bayes

$$\mathcal{P}(b|a)\mathcal{P}(a) = \mathcal{P}(a|b)\mathcal{P}(b), \quad (4.4)$$

n'est plus vrai. En mécanique quantique on doit donc renoncer au concept de probabilité jointe, du moins au sens classique de la théorie de Kolmogorov [Ko], quand les propriétés a et b sont incompatibles. On touche là aux limites de l'interprétation statistique de Max Born.

La difficulté que nous venons d'évoquer est intimement liée au phénomène d'interférence, propre à la mécanique quantique et absent en mécanique classique. Pour voir cela de plus près, soit \bar{a} la propriété contraire de a , correspondant au projecteur $P_{\bar{a}} = I - P_a$. Alors,

$$\begin{aligned} P_b &= (P_a + P_{\bar{a}})P_b(P_a + P_{\bar{a}}) \\ &= P_a P_b P_a + P_{\bar{a}} P_b P_{\bar{a}} + P_a P_b P_{\bar{a}} + P_{\bar{a}} P_b P_a, \end{aligned} \quad (4.5)$$

ou encore,

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\psi(b) &= \mathcal{P}_\psi(b|a)\mathcal{P}_\psi(a) + \mathcal{P}_\psi(b|\bar{a})\mathcal{P}_\psi(\bar{a}) \\ &\quad + 2 \operatorname{Re} \langle \psi | P_a P_b P_{\bar{a}} \psi \rangle. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Le dernier terme de (4.6) est le terme d'interférence. Si a et b sont compatibles il vaut zéro et l'on retrouve le théorème classique des probabilités totales.

Revenons à l'exemple de la particule sans spin dans \mathbb{R} . Nous avons vu qu'un état ψ_1 (ψ_2) décrit une particule qui vient de la gauche (droite) si $P_+^0 \psi_1 = \psi_1$ ($P_-^0 \psi_2 = \psi_2$). Mais, en raison du principe de superposition (\mathcal{H} est un espace vectoriel), $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$ est encore un état possible pour le système qui est bien normalisé à 1 si ψ_1 et ψ_2 le sont aussi (ψ_1 et ψ_2 sont orthogonaux). Si on pose $b = b_r$, $a = (+)$ et $\bar{a} = (-)$ dans (4.6), on aboutit à

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\psi(b_r) &= \frac{1}{2} (\mathcal{P}_{\psi_1}(b_r) + \mathcal{P}_{\psi_2}(b_r)) \\ &\quad + \operatorname{Re} \int_{-r}^r dx \psi_1^*(x) \psi_2(x), \end{aligned} \quad (4.7)$$

d'où l'interprétation du dernier terme de (4.6) comme un terme d'interférence.

De même, le temps de séjour libre dans b_r , pour l'état initial $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_2)$, est de la forme

$$\begin{aligned} T_\psi^0(b_r) &= \frac{1}{2} (T_{\psi_1}^0(b_r) + T_{\psi_2}^0(b_r)) \\ &\quad + \operatorname{Re} \langle \psi_1 | T^0(b_r) \psi_2 \rangle. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Pour le cas $\psi_1(E, +) = -\psi_2(E, -) \equiv \varphi(E)$ i.e., pour un état initial qui est une fonction impaire de l'impulsion⁵, on obtient pour le terme d'interférence la contribution oscillante

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \langle \psi_1 | T^0(b_r) \psi_2 \rangle &= \operatorname{Re} \int_0^\infty dE \psi_1^*(E, +) \langle + | T_E^0(b_r) | - \rangle \psi_2(E, -) \\ &= -\operatorname{Re} \int_0^\infty dE |\varphi(E)|^2 \int_{-r}^r dx \frac{m}{\hbar k} e^{-2ikx} \\ &= -\int_0^\infty dE \frac{\hbar}{2E} \sin(2kr) |\varphi(E)|^2. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Si la région b_r devient de plus en plus grande, c'est à dire $r \rightarrow \infty$, le terme d'interférence dans (4.7) va à zéro en raison de l'orthogonalité de ψ_1 et ψ_2 (dans cette limite le projecteur $P_r \rightarrow I$ au sens fort⁶, et devient donc compatible avec toutes les observables). De manière analogue, le terme d'interférence (4.9) dans le temps de séjour va aussi à zéro à cause du sinus qui devient infiniment oscillant (par le lemme de Riemann-Lebesgue ou, plus simplement, par intégration par parties si $|\varphi(E)|^2$ est suffisamment différentiable).

5. Temps de retard

Nous avons vu dans les paragraphes précédents que faute d'un concept bien défini de temps d'arrivée, il fallait lui préférer en mécanique quantique celui de temps de séjour. On est donc amenés à définir le temps de retard en mécanique quantique non pas comme la différence entre deux temps d'arrivée (comme on le ferait classiquement) mais plutôt comme la différence entre deux temps de séjour. Mais avant de donner une définition précise, il nous sera utile de rappeler quelques aspects de la théorie quantique de la diffusion.

Soit $H = H_0 + V$ l'hamiltonien décrivant un système non relativiste à un corps dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, avec un potentiel V de la forme (3.5), c'est à dire un opérateur de multiplication par une fonction $v(x)$ à courte portée. Soit $\psi \in \mathcal{H}$ l'état du système au temps $t = 0$. Au temps t il vaut $\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \psi$.

Il est possible de classer les vecteurs ψ de \mathcal{H} par l'étude de leur comportement dans l'espace de configuration \mathbb{R}^d , en tant que fonctions de t , quand $t \rightarrow \pm\infty$. On dit que ψ est un état lié si, tout au long de son évolution, il reste essentiellement localisé dans une région bornée de l'espace de configuration. Inversement, on dit que ψ est un état de diffusion s'il se propage en dehors de n'importe quelle région bornée quand $t \rightarrow \pm\infty$ [AJS]. La complétude asymptotique de la théorie revient alors à demander que tout état dans \mathcal{H} est soit un état lié soit un état de diffusion (typiquement, il n'y a pas d'états "absorbés" par l'interaction).

⁵ Si on regarde l'équation de Schrödinger à une dimension comme une équation radiale ($x \geq 0$), alors ψ décrit une onde sphérique de moment angulaire zéro (onde s).

⁶ Si A_n est une suite d'opérateurs bornés avec domaine $D(A_n) = \mathcal{H}$ pour tout n , on dit que $A_n \rightarrow A$ au sens fort si $\lim_{n \rightarrow \infty} \| (A_n - A) \psi \| = 0$, pour tout $\psi \in \mathcal{H}$.

Cela nous amène tout naturellement à l'idée centrale de la théorie (moderne) de la diffusion qui est celle de comparer le mouvement de la particule diffusée (qui évolue avec $e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$) avec celui de la particule libre (qui évolue avec $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}$). En effet, si le potentiel a une décroissance spatiale suffisamment rapide (mieux que Coulomb), il est naturel de penser que la particule aura une évolution essentiellement libre à $t \rightarrow \pm\infty$, quand elle quittera la région d'interaction.

Plus précisément, cela suppose que donné un état de diffusion $\psi \in \mathcal{H}$, il existe deux vecteurs φ_{\pm} (état entrant ou initial et état sortant ou final⁷) tels que

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} \| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\psi - e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi_{\pm} \| = 0. \quad (5.1)$$

Il est alors facile de montrer que les deux conditions asymptotiques (5.1) impliquent l'existence des deux opérateurs d'ondes

$$\Omega_{\pm} = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} e^{\pm\frac{i}{\hbar}Ht} e^{\mp\frac{i}{\hbar}H_0t} \quad (5.2)$$

et, moyennant l'hypothèse de complétude asymptotique, l'existence de l'opérateur unitaire de diffusion

$$S = \Omega_{+}^{\dagger} \Omega_{-}. \quad (5.3)$$

On conclut aussi immédiatement que l'état de diffusion ψ au temps $t = 0$ est relié aux opérateurs d'ondes via les égalités

$$\psi = \Omega_{\pm} \varphi_{\pm}, \quad (5.4)$$

et que S établit le lien entre l'état entrant et l'état sortant par

$$\varphi_{+} = S \varphi_{-}. \quad (5.5)$$

Rappelons encore la propriété d'entrelacement

$$H \Omega_{\pm} = \Omega_{\pm} H_0 \quad (5.6)$$

de laquelle il suit que l'opérateur de diffusion commute avec H_0 i.e.,

$$H_0 S = S H_0. \quad (5.7)$$

De cette dernière propriété (qui n'est rien d'autre que la formulation précise de la loi de conservation de l'énergie cinétique) il suit que

$$\langle E, \hat{k} | S | E', \hat{k}' \rangle = \langle \hat{k} | S_E | \hat{k}' \rangle \delta(E - E'). \quad (5.8)$$

⁷ Il y a ici abus de langage: il serait plus correct d'appeler les vecteurs φ_{-} et φ_{+} représentation entrante et représentation sortante. Les vrais états entrant et sortant sont, bien entendu, $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi_{-}$ et $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi_{+}$, quand $t \rightarrow -\infty$ et $t \rightarrow \infty$, respectivement.

L'opérateur S_E dans (5.8) est appelé matrice de diffusion à énergie E (ou encore opérateur de diffusion sur la couche d'énergie E). C'est encore un opérateur unitaire qui agit sur $L^2(S^{d-1})$, les fonctions des angles de la sphère unité à $d - 1$ dimensions.

Revenons maintenant au concept de temps de séjour. Pour un état de diffusion $\psi = \Omega_- \varphi$, $\varphi \in \mathcal{H}$, la moyenne (3.6) s'écrit

$$T_\varphi(b_r) = \langle \varphi | T(b_r) \varphi \rangle, \quad (5.9)$$

avec $T(b_r)$ qui est l'opérateur (autoadjoint) de temps de séjour

$$\begin{aligned} T(b_r) &= \int dt \Omega_-^\dagger e^{\frac{i}{\hbar} H t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar} H t} \Omega_- \\ &= \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \Omega_-^\dagger P_r \Omega_- e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Pour la dernière égalité nous avons utilisé (5.6) et il est clair que, tout comme pour le temps de séjour libre, $[T(b_r), H_0] = 0$.

Nous sommes maintenant en mesure de donner une définition pour le temps de retard qui soit à la fois précise tant du point de vue conceptuel que mathématique. Soit $\tau_\varphi(b_r)$ la différence

$$\tau_\varphi(b_r) = T_\varphi(b_r) - T_\varphi^0(b_r) \quad (5.11)$$

entre le temps de séjour total pour l'état de diffusion ψ_t et le temps de séjour de référence associé à l'état libre $e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \varphi$, qui coïncide avec ψ_t dans le passé lointain. La différence $\tau_\varphi(b_r)$ est un temps de retard local; il dépend en particulier du rayon r de la boule b_r . Quand $r \rightarrow \infty$, les deux temps de séjour $T_\varphi(b_r)$ et $T_\varphi^0(b_r)$ divergent. Cependant, pour un potentiel suffisamment à courte portée, on s'attend à ce que leur différence reste finie dans cette limite, définissant ainsi le temps de retard τ_φ pour l'état entrant φ :

$$\tau_\varphi = \lim_{r \rightarrow \infty} \tau_\varphi(b_r). \quad (5.12)$$

Du point de vue mathématique se pose bien entendu le problème de l'existence d'une telle limite et de son éventuelle identité avec la formule d'Eisenbud-Wigner (que nous avons déjà évoqué dans l'introduction, voir aussi plus loin). Mais avant de dire quelques mots sur ce problème dans la prochaine section, soyons pédestres et effectuons la limite (5.12) explicitement dans le cas de la particule unidimensionnelle.

Nous supposons, pour simplifier, que le potentiel $v(x)$ est à support compact dans l'intervalle $[-R, R]$, et que la particule vient de la gauche. On obtient alors, pour le temps de séjour (5.9),

$$T_\varphi(b_r) = \int_0^\infty dE \langle + | T_E(b_r) | + \rangle |\varphi(E)|^2 \quad (5.13)$$

avec

$$\begin{aligned}
\langle +|T_E(b_r)|+ \rangle &= 2\pi\hbar \langle E, +|\Omega_-^\dagger P_r \Omega_-|E, + \rangle \\
&= 2\pi\hbar \int_{-r}^r dx |\langle x|\Omega_-|E, + \rangle|^2 \\
&= \frac{m}{\hbar k} \int_{-r}^r dx |\psi(E, x)|^2,
\end{aligned} \tag{5.14}$$

où $\psi(E, x) = \sqrt{2\pi\hbar} \sqrt{\hbar k/m} \langle x|\Omega_-|E, + \rangle$ est la solution physique, par la gauche, de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\left[\partial_x^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - v(x)) \right] \psi(E, x) = 0 \tag{5.15}$$

avec conditions aux bords

$$\psi(E, x) = \begin{cases} e^{ikx} + L_E e^{-ikx}, & x < -R \\ T_E e^{ikx}, & x > R, \end{cases} \tag{5.16}$$

et les coefficients L_E et T_E sont, respectivement, les amplitudes de réflexion et de transmission.

Pour intégrer (5.14) on dérive (5.15) par rapport à l'énergie:

$$\left[\partial_x^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E - v(x)) \right] \partial_E \psi(E, x) + \frac{2m}{\hbar^2} \psi(E, x) = 0. \tag{5.17}$$

On remarque ensuite qu'en multipliant (5.17) par $\psi^*(E, x)$ et utilisant à nouveau (5.15), on aboutit à l'identité

$$|\psi(E, x)|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \partial_x (\partial_x \psi^* \partial_E \psi - \psi^* \partial_x \partial_E \psi) (E, x). \tag{5.18}$$

Si $r > R$, (5.18) dans (5.14) donne, à l'aide de la forme asymptotique (5.16),

$$\begin{aligned}
\langle +|T_E(b_r)|+ \rangle &= |T_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^T + |L_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^L \\
&\quad + \frac{2r}{v} + \frac{\hbar}{2E} |L_E| \sin(\alpha_E^L + 2kr),
\end{aligned} \tag{5.19}$$

où α_E^T et α_E^L sont, respectivement, les phases des amplitudes de transmission et réflexion. Il est intéressant de remarquer que le dernier terme dans (5.19) est un terme d'interférence. Il est de même nature que le terme (4.9) mais cette fois lié au phénomène de réflexion de la particule par le potentiel.

Avec (3.21), on obtient donc pour le temps de retard local $\tau_\varphi(b_r)$, pour $r > R$,

$$\tau_\varphi(b_r) = \int_0^\infty dE \langle +|\tau_E(b_r)|+ \rangle |\varphi(E)|^2, \tag{5.20}$$

avec

$$\begin{aligned}
\langle +|\tau_E(b_r)|+ \rangle &= |T_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^T + |L_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^L \\
&\quad + \frac{\hbar}{2E} |L_E| \sin(\alpha_E^L + 2kr).
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Dans la limite $r \rightarrow \infty$, le terme oscillant ne contribue pas dans l'intégrale (5.20) (à cause du lemme de Riemann-Lebesgue) et on obtient pour le temps de retard

$$\tau_\varphi = \int_0^\infty dE \langle +|\tau_E|+ \rangle |\varphi(E)|^2, \quad (5.22)$$

avec

$$\langle +|\tau_E|+ \rangle = |T_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^T + |L_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^L. \quad (5.23)$$

Un calcul tout à fait analogue peut être effectué pour le cas d'une particule qui approche le potentiel par la droite ou pour le cas plus général d'un état entrant qui est une superposition d'un état venant de la gauche et d'un état venant de la droite. On obtient alors pour le temps de retard la formule générale

$$\begin{aligned} \tau_\varphi &= \int_0^\infty dE \langle \varphi(E) | \tau_E \varphi(E) \rangle_E \\ &= \sum_{\rho, \sigma = \pm} \int_0^\infty dE \varphi^*(E, \rho) \langle \rho | \tau_E | \sigma \rangle \varphi(E, \sigma). \end{aligned} \quad (5.24)$$

L'opérateur τ_E est l'opérateur de temps de retard d'Eisenbud-Wigner, sur la couche d'énergie E . Il peut s'exprimer entièrement en termes de la matrice de diffusion S_E , et de sa dérivée par rapport à l'énergie, par la formule

$$\tau_E = -i\hbar S_E^\dagger \partial_E S_E. \quad (5.25)$$

Pour le problème unidimensionnel S_E est une matrice 2×2 qui vaut, dans la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$,

$$S_E = \begin{pmatrix} T_E & R_E \\ L_E & T_E \end{pmatrix} \quad (5.26)$$

avec R_E l'amplitude de réflexion par la droite. Si, de plus, le potentiel est à symétrie sphérique, $L_E = R_E$, et S_E est diagonale dans la base des fonctions impaires $|o\rangle = (|+\rangle - |-\rangle)/\sqrt{2}$ et paires $|e\rangle = (|+\rangle + |-\rangle)/\sqrt{2}$ de l'impulsion, c'est à dire de la forme

$$S_E = \begin{pmatrix} e^{2i\delta_E^o} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_E^e} \end{pmatrix} \quad (5.27)$$

Dans ce cas, pour une onde entrante impaire piquée autour de l'énergie E , le temps de retard

$$\begin{aligned} \langle o | \tau_E | o \rangle &= -i\hbar e^{-2i\delta_E^o} \partial_E e^{2i\delta_E^o} \\ &= 2\hbar \partial_E \delta_E^o, \end{aligned} \quad (5.28)$$

n'est rien d'autre que la dérivée du déphasage par rapport à l'énergie (c'est la forme originale de la célèbre formule d'Eisenbud-Wigner pour une onde s).

L'intérêt physique des formules (5.23) et (5.28) est surtout en relation au phénomène de résonance. Elles permettent en effet de comprendre ce dernier comme la formation d'un

état métastable de longue durée de vie. Considérons par exemple le cas d'une résonance $|T_{E_r}|^2 = 1$ dans la probabilité de transmission. Dans un voisinage de l'énergie de résonance E_r , on peut montrer que $|T_E|^2$ a la forme Lorentzienne (dite de Breit-Wigner)

$$|T_E|^2 \approx \frac{(\Delta E)^2}{(E - E_r)^2 + (\Delta E)^2}, \quad (5.29)$$

avec ΔE qui est la demi-largeur de la résonance. De même, on montre qu'au voisinage de E_r la phase α_E^T est de la forme

$$\alpha_E^T \approx \beta_E + \arctan\left(\frac{E - E_r}{\Delta E}\right), \quad (5.30)$$

avec β_E qui est appelée la phase de "background". Cette dernière est en général une fonction lentement variable comparée au deuxième terme dans (5.30) et on peut la négliger dans le calcul du temps de retard (5.23) qui devient ($|L_E|^2 \approx 0$ au voisinage de E_r)

$$\langle +|\tau_E|+ \rangle \approx \frac{\hbar/\Delta E}{[(E - E_r)/\Delta E] + 1}. \quad (5.31)$$

On obtient donc que $\langle +|\tau_E|+ \rangle$ est maximum à la résonance et vaut approximativement

$$\langle +|\tau_{E_r}|+ \rangle \approx \frac{\hbar}{\Delta E}. \quad (5.32)$$

La signification de (5.32) est que la durée de vie de la résonance est inversement proportionnelle à sa largeur ΔE . Il est intéressant de remarquer que (5.32) exprime une relation d'incertitude temps-énergie. On peut donc aussi comprendre la théorie du temps de retard, telle que nous l'avons exposée ci-dessus, comme le moyen de donner un sens précis à une telle relation.

6. Le temps de retard et sa limite

L'étude rigoureuse de la limite (5.12) à fait (et continue à faire) l'objet d'une vaste littérature mathématique. Typiquement, on cherche à démontrer l'existence de la limite (5.12) et son identité avec (5.24) pour la plus grande classe possible de potentiels et d'états entrants. Nous nous limitons ici à indiquer seulement quelques points importants sans entrer dans les détails techniques.

Une idée majeure pour étudier (5.12) est due à Martin [Ma2]. Elle consiste à remplacer le temps local $\tau_\varphi(b_r)$ par une autre quantité $\sigma_\varphi(b_r)$, plus simple à étudier, donnée par ($\varphi_t \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\varphi$)

$$\sigma_\varphi(b_r) = \int_0^\infty dt \left[\|P_r S \varphi_t\|^2 - \|P_r \varphi_t\|^2 \right], \quad (6.1)$$

et qui est telle que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} [\tau_\varphi(b_r) - \sigma_\varphi(b_r)] = 0. \quad (6.2)$$

Pour montrer (6.2) on écrit ($\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Omega_-\varphi$)

$$\tau_\varphi(b_r) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[\|P_r\psi_t\|^2 - \|P_r\varphi_t\|^2 \right] \quad (6.3)$$

et on remarque que la différence

$$\begin{aligned} \tau_\varphi(b_r) - \sigma_\varphi(b_r) &= \int_{-\infty}^0 dt \left[\|P_r\psi_t\|^2 - \|P_r\varphi_t\|^2 \right] \\ &\quad + \int_0^{\infty} dt \left[\|P_r\psi_t\|^2 - \|P_rS\varphi_t\|^2 \right]. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Pour chaque t les deux intégrants convergent vers zéro lorsque $r \rightarrow \infty$ (car $P_r \rightarrow I$ quand $r \rightarrow \infty$). Par ailleurs, la valeur absolue du premier peut être majorée uniformément en r par

$$\begin{aligned} \left| \|P_r\psi_t\|^2 - \|P_r\varphi_t\|^2 \right| &= |\langle \psi_t | P_r \psi_t \rangle - \langle \varphi_t | P_r \varphi_t \rangle| \\ &\leq |\langle \psi_t - \varphi_t | P_r \psi_t \rangle| + |\langle \psi_t | P_r (\psi_t - \varphi_t) \rangle| \\ &\leq 2 \| \psi_t - \varphi_t \| . \end{aligned} \quad (6.5)$$

De manière analogue, le deuxième intégrant peut être majoré uniformément en r par $2 \| \psi_t - S\varphi_t \|$. Ainsi, en appliquant le théorème de la convergence dominée de Lebesgue, il suit que (6.2) est satisfaite si

$$\int_{-\infty}^0 dt \| \psi_t - \varphi_t \| < \infty \quad (6.6)$$

et

$$\int_0^{\infty} dt \| \psi_t - S\varphi_t \| < \infty, \quad (6.7)$$

i.e., si les deux conditions asymptotiques (5.1) sont intégrables à l'infini.

Reste ensuite à étudier le comportement asymptotique de $\sigma_\varphi(b_r)$ pour $r \rightarrow \infty$. Pour cela, on commence par remarquer qu'on peut mettre ce dernier sous la forme

$$\sigma_\varphi(b_r) = \langle \varphi | S^\dagger [T_0(b_r), S] \varphi \rangle \quad (6.8)$$

avec

$$T_0(b_r) = \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}. \quad (6.9)$$

Un résultat dû à Amrein et Cibils [AC] montre alors que pour le sous-ensemble dense \mathcal{D}_2 de \mathcal{H} des états qui sont dans le domaine de q^2 et qui ont un support compact en énergie en dehors de l'origine, on a, au sens faible⁸

$$T_0(b_r) = T_0 + \sqrt{\frac{m}{2H_0}} r + o(1), \quad (6.10)$$

⁸ Si A_n est une suite d'opérateurs bornés avec domaine $D(A_n) = \mathcal{H}$ pour tout n , on dit que $A_n \rightarrow A$ au sens faible si $\lim_{n \rightarrow \infty} |\langle \psi | (A_n - A) \varphi \rangle| = 0$, pour tout $\psi, \varphi \in \mathcal{H}$.

avec T_0 qui est l'opérateur symétrique (2.9). Insérant la représentation asymptotique (6.10) dans (6.8), on obtient pour le temps de retard (5.12) la formule

$$\tau_\varphi = \langle \varphi | S^\dagger [T_0, S] \varphi \rangle, \quad (6.11)$$

pour autant que

$$\varphi, S\varphi \in \mathcal{D}_2. \quad (6.12)$$

Pour terminer, remarquons que, d'après les relations de commutation (2.2),(2.10), l'opérateur T_0 agit par différentiation dans la représentation spectrale de H_0 , c'est à dire, formellement,

$$\langle E | T_0 = -i\hbar \partial_E \langle E |. \quad (6.13)$$

Il suit que si la matrice S_E est continûment différentiable par rapport à E , dans un intervalle donné $[a, b]$ [au sens fort dans $L^2(S^{d-1})$], et que l'état entrant φ a son support en énergie contenu dans ce même intervalle, alors

$$\begin{aligned} \tau_\varphi &= \langle \varphi | S^\dagger [T_0, S] \varphi \rangle \\ &= -i\hbar \int_0^\infty dE \left[\langle \varphi(E) | S_E^\dagger \partial_E S_E \varphi(E) \rangle_E - \langle \varphi(E) | \partial_E \varphi(E) \rangle_E \right] \\ &= -i\hbar \int_0^\infty dE \langle \varphi(E) | (S_E^\dagger \partial_E S_E) \varphi(E) \rangle_E, \end{aligned} \quad (6.14)$$

ce qui n'est rien d'autre que la formule (5.24),(5.25) de Eisenbud et Wigner. Les conditions (6.6),(6.7),(6.12) et la différentiabilité de S_E constituent le coeur dur technique de la preuve de l'existence de la limite du temps de retard et de son identité avec la formule d'Eisenbud-Wigner. Pour les développements mathématiques concernant ces conditions, nous renvoyons le lecteur intéressé aux articles [Ma1,2],[AC],[ACS] et à ceux qui sont cités dans ces références.

7. Heuristique classique du temps de retard quantique

Nous avons commencé cette introduction sur les concepts de temps de séjour et de retard en théorie quantique de la diffusion par une note négative: l'absence d'une observable de temps d'arrivée. Par l'introduction du concept de temps de séjour nous avons contourné cette difficulté et donné un sens précis à une observable de temps de retard. Nous voulons dans cette section renverser la logique et montrer que la théorie du temps de retard, telle que nous venons de l'exposer, peut aussi être comprise comme une manière de justifier l'usage de l'opérateur de temps formel T_0 . Dit autrement, nous allons montrer dans quel sens il est possible de reconforter le préjugé classique qui nous pousse à imaginer le temps de retard comme la différence entre deux temps d'arrivée.

Pour cela, revenons à la diffusion d'une particule classique. Soit $\{x(t), p(t)\}$ sa trajectoire en présence d'un potentiel $v(x)$. Si elle est de diffusion, elle peut être caractérisée par son comportement asymptotique libre dans le passé et dans le futur

$$x(t) = \begin{cases} x_-^0(t) = x_- + p_-t/m, & t \rightarrow -\infty \\ x_+^0(t) = x_+ + p_+t/m, & t \rightarrow +\infty, \end{cases} \quad (7.1)$$

avec $p_{\pm} = \lim_{t \rightarrow \pm\infty} p(t)$ et, par conservation de l'énergie, $|p_-| = |p_+| \equiv |p|$.

Classiquement, il est naturel de définir le temps de retard comme la différence entre le temps d'arrivée $t(r)$ de la particule diffusée, dans le futur, à une distance r grande de l'origine, et le temps $t^0(r)$ mis pour couvrir cette même distance par la particule libre de référence qui est soumise aux mêmes conditions initiales dans le passé. Cela revient à poser $|x(t)| = r$ dans (7.1), ce qui donne

$$\begin{aligned} t(r) &\sim \frac{m}{|p|} \hat{p}_+ (r \hat{x}(t) - x_+) \\ &\sim \frac{m}{|p|} r - \frac{m}{|p|} \hat{p}_+ x_+, \end{aligned} \quad (7.2)$$

avec $\hat{p}_+ = p_+/|p|$, $\hat{x}(t) = x(t)/r$, et on a utilisé $\hat{x}(t) \sim \hat{p}_+$ pour $t \rightarrow \infty$. En procédant de manière analogue pour le mouvement libre de référence $x_-^0(t)$, on obtient

$$t^0(r) \sim \frac{m}{|p|} r - \frac{m}{|p|} \hat{p}_- x_-. \quad (7.3)$$

La différence entre (2.7) et (2.8) est le temps de retard classique qui vaut

$$\tau = -\frac{m}{|p|} (\hat{p}_+ x_+ - \hat{p}_- x_-), \quad (7.4)$$

c'est à dire la différence

$$\tau = t_+ - t_- \quad (7.5)$$

entre les temps

$$t_+ = -\frac{m}{|p|} \hat{p}_+ x_+ \quad \text{et} \quad t_- = -\frac{m}{|p|} \hat{p}_- x_- \quad (7.6)$$

de passage de la trajectoire libre sortante $\{x_+^0(t), p_+\}$, respectivement entrante $\{x_-^0(t), p_-\}$, par le plan qui passe par l'origine et qui est orthogonal à la direction \hat{p}_+ , respectivement \hat{p}_- , du mouvement.

Fort de cette analyse (qu'il serait aisé de rendre quelque peu plus rigoureuse), il est tentant de prendre (7.5), (7.6) comme une définition a priori du temps de retard pour un processus de diffusion. Pour le cas quantique, il suffit alors de remplacer les observables classiques (7.6) par leur analogue quantique, en utilisant le principe de correspondance et la règle de symétrisation. Cela donne $t_- = \langle \varphi_- | T_0 \varphi_- \rangle$ et $t_+ = \langle \varphi_+ | T_0 \varphi_+ \rangle$, avec T_0 qui est

l'opérateur symétrique (2.9). Il suit que l'analogie quantique formel de la différence (7.5) vaut ($\varphi_+ = S\varphi$, et nous avons posé $\varphi \equiv \varphi_-$)

$$\begin{aligned}
 \tau_\varphi &= \langle \varphi_+ | T_0 \varphi_+ \rangle - \langle \varphi_- | T_0 \varphi_- \rangle \\
 &= \langle \varphi | S^\dagger T_0 S \varphi \rangle - \langle \varphi | T_0 \varphi \rangle \\
 &= \langle \varphi | S^\dagger [T_0, S] \varphi \rangle,
 \end{aligned} \tag{7.7}$$

ce qui n'est rien d'autre que la formule (6.11) pour le temps de retard, déjà dérivée dans la section précédente à partir du concept de temps de séjour.

En d'autres termes, l'opérateur de temps de retard $S^\dagger [T_0, S]$ n'est rien d'autre que la différence entre les opérateurs de temps d'arrivée sortant $S^\dagger T_0 S$ et entrant T_0 . Même si ces derniers ne sont pas, pris individuellement, des observables, leur différence fait bien sens puisque $S^\dagger [T_0, S]$ est autoadjoint [AJS],[Je].

On peut donc aussi comprendre la limite (5.12) pour le temps de retard comme une procédure rigoureuse d'inversion (tant du point de vue mathématique que conceptuel), permettant de passer de la variable de contrôle temps à la variable de contrôle position, c'est à dire, en quelque sorte, de passer de la probabilité d'être au point x au temps t à la probabilité d'arriver au temps t au point x , et de justifier par la même occasion l'usage de l'opérateur de temps formel T_0 , au sens d'une différence, en théorie de la diffusion.

II. Le rôle des régions dans la définition du temps de retard

1. Introduction

Nous avons rappelé au chapitre I que le temps de retard est défini en mécanique quantique comme la différence entre deux temps de séjour dans une boule b_r centrée à l'origine, dans la limite où le rayon r est envoyé à l'infini, c'est à dire dans la limite où $b_r \rightarrow \mathbb{R}^d$. Il est alors naturel de se demander si le résultat de la limite, et son existence, peuvent dépendre de ce choix très particulier pour la forme des régions de localisation.

Considérons par exemple le cas de la particule unidimensionnelle et choisissons au lieu de la suite $b_r = [-r, r]$, celle des intervalles translétés $b_r(c) = [-r + c, r + c]^1$. Une généralisation immédiate du calcul de la section I.5 donne pour le temps de séjour dans $b_r(c)$ (pour une particule venant de la gauche et r grand)

$$\begin{aligned} \langle +|T_E[b_r(c)]|+ \rangle &= |T_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^T + |L_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^L \\ &+ \frac{2}{v} (r - c |L_E|^2) \\ &+ \frac{\hbar}{2E} |L_E| \sin(\alpha_E^L + 2kr). \end{aligned} \quad (1.1)$$

D'autre part, le temps de séjour libre $\langle +|T_E^0[b_r(c)]|+ \rangle$ est toujours égale à $2r/v$ et ne dépend pas de c . On obtient donc pour le temps de retard (dans la limite $r \rightarrow \infty$ et une fois éliminés les termes oscillants) l'expression

$$\begin{aligned} \langle +|\tau_E(c)|+ \rangle &= |T_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^T + |L_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^L \\ &- \frac{2c}{v} |L_E|^2. \end{aligned} \quad (1.2)$$

¹ On se limitera ici à des suites d'intervalles convexes dont la taille augmente par dilatation à partir de l'origine. Des choix plus exotiques sont bien entendu possibles mais leur intérêt physique est limité.

Par ce simple calcul on découvre que le temps de retard est sensible au choix du centre c de la boule b_r . Pour la particule venant de la droite un calcul semblable donne

$$\begin{aligned} \langle -|\tau_E(c)|- \rangle &= |T_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^T + |R_E|^2 \hbar \partial_E \alpha_E^R \\ &+ \frac{2c}{v} |R_E|^2. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Pour comprendre la nature de ces corrections, une simple analogie classique suffit. Une particule classique est transmise si son énergie $E > \sup_x v(x)$. Elle parcourra alors toute la largeur $2r$ de l'intervalle $b_r(c)$. Donc, en dehors d'un possible effet d'accélération (positive ou négative) dans la région du potentiel, elle effectuera le même parcours libre que la particule de référence. Par contre, si la particule est réfléchiée [$E < \sup_x v(x)$], et vient par exemple de la gauche, son parcours libre sera essentiellement de longueur $2(r - c)$ et différera donc de $-2c$ de celui de référence ($2c$ pour la particule venant de la droite), ce qui explique l'origine des termes correctifs dans (1.2) et (1.3).

A plus qu'une dimension d'espace, on peut considérer des régions de la forme

$$\begin{aligned} \Sigma_r(c) &= \left\{ x \in \mathbb{R}^n \mid \frac{x-c}{r} \in \Sigma_1, r > 0 \right\} \\ &\rightarrow \mathbb{R}^d, \text{ pour } r \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (1.4)$$

avec Σ_1 qui est une région convexe, qui contient l'origine, et dont le bord est suffisamment lisse. Nous montrerons dans l'article qui suit que (i) la limite $r \rightarrow \infty$ pour le temps de retard local $\tau_\varphi[\Sigma_r(c)]$ existe, en général, seulement si Σ_1 est une boule centrée à l'origine et, (ii) si c'est le cas, pour $c \neq 0$, la limite n'est pas donnée par l'opérateur d'Eisenbud-Wigner mais par l'opérateur translaté

$$\tau_E(c) = -i\hbar S_E^\dagger \partial_E S_E + \frac{c}{v} \cdot (S_E^\dagger \hat{p} S_E - \hat{p}). \quad (1.5)$$

Ce résultat nous rappelle que le temps de retard est une quantité relative, qui dépend des différents choix à priori possibles pour le temps de référence. Le point (i) nous dit que parmi ces temps certains ne sont pas admissibles. Le point (ii) nous donne une classe de temps admissibles et nous dit comment le temps de retard va dépendre de leur choix².

Il est cependant possible de construire une quantité plus intrinsèque, qu'on appelle parfois temps de retard total, et qui ne dépend pas de la manière dont les régions Σ_r approchent \mathbb{R}^d . Cette quantité est la trace

$$\text{Tr } \tau_E(\Sigma_r) = \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \langle \hat{k} | \tau_E(\Sigma_r) | \hat{k} \rangle \quad (1.6)$$

² Il existe une exception à ce résultat. Si le potentiel est à symétrie sphérique et l'état entrant est de moment cinétique ℓ et m fixé, la limite ne dépend pas du choix de la séquence Σ_r , comme on pourra le vérifier par inspection directe des formules dans l'article ci-après.

de l'opérateur de temps de retard local $\tau_E(\Sigma_r) = T_E(\Sigma_r) - T_E^0(\Sigma_r)$ sur la couche d'énergie E . On montre alors que la limite $r \rightarrow \infty$ de (1.6) existe en général (au sens des distributions) indépendamment du choix de la suite $\Sigma_r \rightarrow \mathbb{R}^d$ [Ma1], et est donnée par la trace

$$\text{Tr } \tau_E = -i\hbar \int d\hat{k} \langle \hat{k} | S_E^\dagger \partial_E S_E | \hat{k} \rangle \quad (1.7)$$

de l'opérateur d'Eisenbud-Wigner. On peut ici le vérifier directement pour $d = 1$. Dans ce cas la trace (1.7) est simplement la somme de (1.2) et (1.3). Comme $|L_E| = |R_E|$, elle ne dépend pas de c .

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

M. Sassoli de Bianchi et Ph. A. Martin, *On the definition of time-delay in scattering theory*, Helv. Phys. Acta **65**, 1992, pp. 1119-1126.

On the definition of time delay in scattering theory

M. Sassoli de Bianchi and Ph. A. Martin

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. We show that the time delay of a scattering process, defined as the difference of interacting and free sojourn times for increasing spatial regions, can only exist for sequences of dilated balls. The transformation properties of the Eisenbud-Wigner formula under translations are discussed.

1. Introduction

The theory of time delay has been the subject of numerous studies in the past. A commonly adopted definition of time delay involves the concept of the average sojourn time of the particle in a finite spatial region Σ . Consider a potential scattering system with total Hamiltonian $H = H_0 + v$ and free hamiltonian $H_0 = -\Delta/2m$, where Δ is the Laplacian on $L^2(\mathbb{R}^n)$, $n \leq 3$ (m is the mass of the particle and we have set $\hbar = 1$) and denote $V_t = \exp(-iHt)$, $U_t = \exp(-iH_0t)$ the corresponding evolution groups. We assume that the potential v is such that the wave operators $\Omega_{\pm} \equiv s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} V_{\pm t}^{\dagger} U_{\pm t}$ exist and are complete and the scattering operator $S \equiv \Omega_{+}^{\dagger} \Omega_{-}$ is unitary [1].

To each finite spatial region $\Sigma \subset \mathbb{R}^n$, one can associate the corresponding total and free sojourn times in Σ with incoming state φ

$$\begin{aligned} T_{\Sigma}(\varphi) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \| P_{\Sigma} V_t \Omega_{-} \varphi \|^2, \\ T_{\Sigma}^0(\varphi) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \| P_{\Sigma} U_t \varphi \|^2 \end{aligned} \tag{1.1}$$

where P_{Σ} denotes the projection operator onto the subspace of states localized in the region Σ . Then, the time delay of a scattering event with incoming state φ is defined as the difference of the total and free sojourn times as the region Σ extends over the whole space (see the review article [2])

$$\tau(\varphi) \equiv \lim_{\Sigma \rightarrow \mathbb{R}^n} \tau_{\Sigma}(\varphi) \tag{1.2}$$

with

$$\tau_{\Sigma}(\varphi) \equiv T_{\Sigma}(\varphi) - T_{\Sigma}^0(\varphi). \tag{1.3}$$

A large literature is devoted to the proof of the existence of the limit (1.2) and its identity to the Eisenbud-Wigner time delay formula ¹ (see in particular [3]-[11])

$$\tau_{\text{E-W}}(\varphi) \equiv -i \left(\varphi, S^\dagger \frac{dS}{dH_0} \varphi \right). \quad (1.4)$$

Although they bring into play a variety of mathematical methods, all the above mentioned references use only sequences of balls centered at the origin in their proofs. Therefore the question arises: does the limit (1.2) exist with other approximating sequences of regions Σ , for a sufficiently large class of potentials and of incoming states?

The authors generally do not motivate the choice of balls centered at the origin. Sometimes they hint more or less explicitly that it is a matter of convenience and that the time delay should not depend on a particular choice of a sequence $\Sigma \rightarrow \mathbb{R}^n$ in the limit (1.2) ². The purpose of this note is to clarify this question by establishing the two following points. Let Σ_1 be a fixed spatial region containing the origin. We assume that Σ_1 is a convex subset of \mathbb{R}^n with "smooth surface" i.e., the boundary $\partial\Sigma_1$ of Σ_1 is a $(n-1)$ -dimensional differentiable manifold. Considering domains $\Sigma_r(0)$ that are dilation of Σ_1 from the origin and their translates $\Sigma_r(\mathbf{c})$, $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^n$,

$$\Sigma_r(\mathbf{c}) = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \mid \frac{\mathbf{x} - \mathbf{c}}{r} \in \Sigma_1, r > 0 \right\} \quad (1.5)$$

we show that

- (i) $\lim_{r \rightarrow \infty} \tau_{\Sigma_r(\mathbf{c})}(\varphi)$ can exist in general only if Σ_1 is a ball centered at the origin;
- (ii) in the latter case, the limit agrees with the E-W formula (1.4) only if $\mathbf{c} = 0$.

Since the results (i) and (ii) are of geometrical origin, we first establish them in the context of the classical scattering theory in section 2. We treat the quantum mechanical case in section 3 and present some comments in section 4.

2. Classical scattering

We follow essentially the treatment presented in [11]. Let $\{\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)\}$ be a classical scattering trajectory with asymptotic momenta $\mathbf{p}_\pm \equiv \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \mathbf{p}(t)$ ($|\mathbf{p}_+| = |\mathbf{p}_-| \equiv |\mathbf{p}|$ because of energy conservation) and set $\tilde{\mathbf{x}}(t) \equiv \mathbf{x}(t) - \mathbf{p}(t)t/m$. Denoting by $-t_-$ and t_+ ($t_\pm > 0$) the times at which the particle enters and leaves the region $\Sigma_r(\mathbf{c})$ and assuming

¹ In this paper the general formula (1.4) is referred to as the Eisenbud-Wigner (E-W) formula. Sometimes, E-W formula designates the energy derivative of the phase shifts in the special case of spherical symmetry.

² For instance, in [3] it is noted that the result of proposition 2 of this reference is independent of the choice of Σ , but in fact its application to potential scattering requires the use of balls centered at the origin. See also the final discussion in [10].

where

$$\tau_{\Sigma_r(c)}^1 \equiv \frac{m}{|\mathbf{p}|^2} (\mathbf{p}_- \cdot \tilde{\mathbf{x}}_- - \mathbf{p}_+ \cdot \tilde{\mathbf{x}}_+) \quad (2.6)$$

$$\tau_{\Sigma_r(c)}^2 \equiv \frac{m}{|\mathbf{p}|^2} (\mathbf{p}_+ \cdot \mathbf{x}_+ - \mathbf{p}_- \cdot \mathbf{x}_+^0) \quad (2.7)$$

As $r \rightarrow \infty$ (i.e., $t_{\pm} \rightarrow \infty$), the first contribution (2.6) will be given by

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tau_{\Sigma_r(c)}^1 = \frac{m}{|\mathbf{p}|^2} \left(\lim_{t \rightarrow -\infty} \mathbf{p}(t) \cdot \tilde{\mathbf{x}}(t) - \lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{p}(t) \cdot \tilde{\mathbf{x}}(t) \right) \equiv \tau^{\text{cl}} \quad (2.8)$$

This limit (which is trivial for a potential with compact support) has been shown to exist for a large class of potentials and to be equal to the usual classical time delay (τ^{cl} is the classical analogue of the E-W time delay (1.4)) [11].

It remains to examine the second contribution (2.7). Consider first domains $\Sigma_r \equiv \Sigma_r(0)$ that are dilated from the origin and let $d(\hat{\mathbf{u}})$ be the distance from the origin to the boundary $\partial\Sigma_1$ of the initial region Σ_1 in the direction $\hat{\mathbf{u}}$ ($|\hat{\mathbf{u}}| = 1$). As $r \rightarrow \infty$ we have

$$\mathbf{x}_+^0 = (rd(\hat{\mathbf{p}}_-) + B^0)\hat{\mathbf{p}}_- + \mathbf{b}_- + O(r^{-1}) \quad (2.9)$$

$$\mathbf{x}_+ = (rd(\hat{\mathbf{p}}_+) + B)\hat{\mathbf{p}}_+ + \mathbf{b}_+ + O(r^{-1}) \quad (2.10)$$

where B^0, B are finite quantities which vanish if Σ_1 is a ball centered at the origin, $\hat{\mathbf{p}}_{\pm} \equiv \mathbf{p}_{\pm}/|\mathbf{p}|$, and \mathbf{b}_{\mp} are the incoming and outgoing impact parameters (see fig.1). To show (2.9), consider, as r varies, that $d(\hat{\mathbf{x}}_+^0) = d(\cos\theta\hat{\mathbf{p}}_- + \sin\theta\hat{\mathbf{b}}_-) \equiv f(\theta)$ is a function of the angle θ between $\hat{\mathbf{x}}_+^0 \equiv \mathbf{x}_+^0/|\mathbf{x}_+^0|$ and $\hat{\mathbf{p}}_-$, given by

$$\sin\theta = \frac{|\mathbf{b}_-|}{|\mathbf{x}_+^0|} = \frac{|\mathbf{b}_-|}{rd(\hat{\mathbf{x}}_+^0)} \quad (2.11)$$

Thus, one has

$$\begin{aligned} d(\hat{\mathbf{x}}_+^0) &= d(\hat{\mathbf{p}}_-) + O(r^{-1}), \\ \theta &= \frac{|\mathbf{b}_-|}{rd(\hat{\mathbf{p}}_-)} + O(r^{-2}) \end{aligned} \quad (2.12)$$

and for r large, one obtains

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_+^0 &= |\mathbf{x}_+^0|\hat{\mathbf{x}}_+^0 = rf(\theta)(\cos\theta\hat{\mathbf{p}}_- + \sin\theta\hat{\mathbf{b}}_-) \\ &= r \left(d(\hat{\mathbf{p}}_-) + \frac{|\mathbf{b}_-|}{rd(\hat{\mathbf{p}}_-)} f'(0) \right) \left(\hat{\mathbf{p}}_- + \frac{\mathbf{b}_-}{rd(\hat{\mathbf{p}}_-)} \right) + O(r^{-1}) \end{aligned} \quad (2.13)$$

This gives (2.9) with $B^0 = |\mathbf{b}_-|f'(0)/d(\hat{\mathbf{p}}_-)$. Obviously, for a ball centered at the origin $f(\theta) = 1$ and $B^0 = 0$. One finds (2.10) in the same way. Thus,

$$\hat{\mathbf{p}}_- \cdot \mathbf{x}_+^0 = rd(\hat{\mathbf{p}}_-) + B^0 + O(r^{-1}) \quad (2.14)$$

$$\hat{\mathbf{p}}_+ \cdot \mathbf{x}_+ = rd(\hat{\mathbf{p}}_+) + B + O(r^{-1}) \quad (2.15)$$

For the translated domains $\Sigma_r(\mathbf{c})$, $\mathbf{c} \neq 0$, the same formulae (2.14),(2.15) hold for $\hat{\mathbf{p}}_- \cdot (\mathbf{x}_+^0 - \mathbf{c})$ and $\hat{\mathbf{p}}_+ \cdot (\mathbf{x}_+ - \mathbf{c})$. Hence, one finds in general

$$\tau_{\Sigma_r(\mathbf{c})}^2 = \frac{m}{|\mathbf{p}|} \left(r(d(\hat{\mathbf{p}}_+) - d(\hat{\mathbf{p}}_-)) + \mathbf{c} \cdot (\hat{\mathbf{p}}_+ - \hat{\mathbf{p}}_-) + B - B^0 \right) + O(r^{-1}) \quad (2.16)$$

If the limit of $\tau_{\Sigma_r(\mathbf{c})}^2$, as $r \rightarrow \infty$, has to exist for all possible scattering events, then $d(\hat{\mathbf{p}}_+) = d(\hat{\mathbf{p}}_-)$ for all $\hat{\mathbf{p}}_+$, implying that Σ_1 must be a ball centered at the origin. This establishes (i). In this case one has $B = B^0 = 0$ and (2.5),(2.8),(2.16) give

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tau_{\Sigma_r(\mathbf{c})} = \tau^{\text{cl}} + \mathbf{c} \cdot \frac{m}{|\mathbf{p}|} (\hat{\mathbf{p}}_+ - \hat{\mathbf{p}}_-) \quad (2.17)$$

Therefore, it follows from (2.17) that $\lim_{r \rightarrow \infty} \tau_{\Sigma_r(\mathbf{c})} = \tau^{\text{cl}}$ only if $\mathbf{c} = 0$, showing (ii).

3. Quantum mechanical scattering

Here we follow the method of [6], assuming the conditions of the proposition 2 of this reference. Let $\tau_{\Sigma_r}(\varphi)$ be the time delay for a dilated region Σ_r with characteristic function

$$\chi_{\Sigma_r}(\mathbf{x}) = \chi_{\Sigma_1}(\mathbf{x}/r) = \begin{cases} 1 & \text{if } \mathbf{x}/r \in \Sigma_1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.1)$$

Then the following facts are true

$$(a) \quad \lim_{r \rightarrow \infty} (\tau_{\Sigma_r}(\varphi) - \sigma_{\Sigma_r}(\varphi)) = 0 \quad (3.2)$$

where

$$\sigma_{\Sigma_r}(\varphi) \equiv \int_0^\infty dt \left((S\varphi, U_t^\dagger \chi_{\Sigma_r}(\mathbf{q}) U_t S\varphi) - (\varphi, U_t^\dagger \chi_{\Sigma_r}(\mathbf{q}) U_t \varphi) \right) \quad (3.3)$$

(b) The difference

$$K_r(\varphi) \equiv \int_0^\infty dt (\varphi, U_t^\dagger \chi_{\Sigma_r}(\mathbf{q}) U_t \varphi) - r \int_0^\infty du (\varphi, \frac{m}{|\mathbf{p}|} \chi_{\Sigma_1}(u\hat{\mathbf{p}}) \varphi) \quad (3.4)$$

remains bounded as $r \rightarrow \infty$ and the same is true for $K_r(S\varphi)$.

The point (a) is a general fact which does not depend on the choice of the region Σ_1 (see the case (B) in the proposition 2 of ref. [6]). The result (b) is obtained by the same arguments as in (iii) p.488-489 of ref. [6]³. The combination of (a) and (b) shows that $\tau_{\Sigma_r}(\varphi)$ can have a limit only if

$$r \int_0^\infty du \left((S\varphi, \frac{m}{|\mathbf{p}|} \chi_{\Sigma_1}(u\hat{\mathbf{p}}) S\varphi) - (\varphi, \frac{m}{|\mathbf{p}|} \chi_{\Sigma_1}(u\hat{\mathbf{p}}) \varphi) \right) \quad (3.5)$$

³ Note that, except for the use of the more general region Σ_r , $K_r(\varphi)$ is identical to the definition (18) of ref. [6] (for finite r and taking (16),(17) of this reference into account). In ref. [6] the mass m is set equal to 1/2.

has a limit as $r \rightarrow \infty$. Noting that $\int_0^\infty du \chi_{\Sigma_1}(u\hat{\mathbf{k}}) = d(\hat{\mathbf{k}})$, (3.5) can be written in the alternative forms (using $[S, H_0] = 0$)

$$r \left(\varphi, \frac{m}{|\mathbf{p}|} (S^\dagger d(\hat{\mathbf{p}}) S - d(\hat{\mathbf{p}})) \varphi \right) = r \int d^n k \frac{m}{|\mathbf{k}|} d(\hat{\mathbf{k}}) (|\widetilde{S\varphi}(\mathbf{k})|^2 - |\tilde{\varphi}(\mathbf{k})|^2) \quad (3.6)$$

This is clearly the quantum analogue of the classical term $r(m/|\mathbf{p}|)(d(\hat{\mathbf{p}}_+) - d(\hat{\mathbf{p}}_-))$ occurring in (2.16). Because of the unitarity of S on the energy shell, it vanishes if Σ_1 is a ball centered at the origin ($d(\hat{\mathbf{k}}) = 1$). If Σ_1 is not spherical, the factor of r in (3.6) will certainly not vanish for some scattering system and some choice of the incoming state φ : thus τ_{Σ_r} diverges as $r \rightarrow \infty$. For the case of translated regions $\Sigma_r(\mathbf{c})$, it suffices to replace $\chi_{\Sigma_r}(\mathbf{q})$ by $\chi_{\Sigma_r}(\mathbf{q} - \mathbf{c})$ in (3.4) or equivalently $K_r(\varphi)$ by $K_r^{\mathbf{c}}(\varphi) \equiv K_r(e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{c}}\varphi)$. Thus $K_r^{\mathbf{c}}(\varphi)$ and $K_r^{\mathbf{c}}(S\varphi)$ are bounded as $r \rightarrow \infty$ and the conclusion is the same. This shows (i) in the quantum case.

When Σ_1 is a ball centered at the origin and $\mathbf{c} = 0$, it is shown in [6] that

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tau_{\Sigma_r}(\varphi) = (\varphi, S^\dagger [S, A_0] \varphi) = \tau_{\text{E-w}}(\varphi) \quad (3.7)$$

with

$$A_0 \equiv \frac{m}{2} \left(\frac{1}{|\mathbf{p}|^2} \mathbf{p} \cdot \mathbf{q} + \mathbf{q} \cdot \mathbf{p} \frac{1}{|\mathbf{p}|^2} \right)$$

If $\mathbf{c} \neq 0$, A_0 is replaced by its translate $e^{-i\mathbf{c}\cdot\mathbf{p}} A_0 e^{i\mathbf{c}\cdot\mathbf{p}} = A_0 - \mathbf{c} \cdot m\mathbf{p}/|\mathbf{p}|^2$ giving in this case

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \tau_{\Sigma_r(\mathbf{c})}(\varphi) = \tau_{\text{E-w}}(\varphi) + \mathbf{c} \cdot \left(\varphi, \frac{m}{|\mathbf{p}|} (S^\dagger \hat{\mathbf{p}} S - \hat{\mathbf{p}}) \varphi \right) \quad (3.8)$$

which is the quantum analogue of (2.17). Hence (ii) follows.

4. Concluding remarks

The present analysis shows that the definition (1.2)-(1.3) of the time delay with incoming state φ makes sense only for balls. Classically this follows from the purely geometrical fact that the difference between the interacting and free trajectory lengths remains finite, in general, only for balls. Thus (2.17) or (3.8) are the most general formulae for the time delay defined as a difference of sojourn times for sequences of increasing spatial regions.

Let us investigate the transformation properties of (3.8) under translations⁴. If the origin of the spatial coordinate system is translated to a point \mathbf{a} , one has

$$S \longrightarrow S_{\mathbf{a}} \equiv e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}} S e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}} \quad (4.1a)$$

$$\varphi \longrightarrow \varphi_{\mathbf{a}} \equiv e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}} \varphi \quad (4.1b)$$

$$\mathbf{c} \longrightarrow \mathbf{c} - \mathbf{a} \quad (4.1c)$$

⁴ The same discussion and the same conclusions apply to the classical formula (2.17).

We observe that the complete formula (3.8) is invariant under the transformation (4.1), whereas the E-W formula (1.4) is not⁵. Indeed, if $\tau_{\text{E-W}}^{\mathbf{a}}(\varphi)$ is the E-W formula for the translated system, one obtains easily (using $d|\mathbf{p}|/dH_0 = m/|\mathbf{p}|$)

$$\begin{aligned}\tau_{\text{E-W}}^{\mathbf{a}}(\varphi) &= -i \left(\varphi_{\mathbf{a}}, S_{\mathbf{a}}^{\dagger} \frac{dS_{\mathbf{a}}}{dH_0} \varphi_{\mathbf{a}} \right) \\ &= \tau_{\text{E-W}}(\varphi) + \mathbf{a} \cdot \left(\varphi, \frac{m}{|\mathbf{p}|} (S^{\dagger} \hat{\mathbf{p}} S - \hat{\mathbf{p}}) \varphi \right)\end{aligned}\quad (4.2)$$

On the other hand, the formula (3.8) remains clearly invariant under the transformation (4.1), as it should be by its very definition.

Therefore, the E-W formula (1.4) (obtained by setting $\mathbf{c} = 0$ in (3.8)) must be interpreted as follows: it refers to the S -operator and the incoming state φ in a frame having its origin located at the dilation center of the balls. Dilation around different points will distinguish among different translated systems according to (4.1a),(4.1b)⁶.

We note that the situation is simpler when we consider cross-sections. A translation of the origin of the coordinate system will result in phase factors in the scattering amplitude and thus lead to the same cross-section. In other words, cross-section measurements give intrinsic information on the scattering potential, independently of the choice of the reference frame. Is it possible to obtain also such information from the time delay? In the case where the potential is spherically symmetric, the answer is obvious: choose as dilation center the center of the potential itself. This is the choice made in most of the papers without further comment. In this situation the E-W formula (1.4) agrees with the energy derivatives of the conventional phase-shifts; thus time delay and cross section yield in principle the same information. If the potential has no specific symmetry, there is no privileged center and the time delay depends on a conventional choice of the origin of the reference frame.

There exists however in all cases a more global intrinsic quantity, namely the trace $\text{Tr}_E \tau_E$ of the energy shell time delay $\tau_E = -i S_E^{\dagger} dS_E / dE$. It is proven in [15,2] that this quantity is independent of the choice of the sequence $\Sigma \rightarrow \mathbb{R}^n$, i.e. it is the same for sequences of dilated regions of any shape around any center. This result is compatible with the discussion of the present paper. Indeed, under suitable conditions, one establishes in [15] that $S_E - I$ is a trace-class operator, implying that the trace on the energy shell of the term (3.6) is well defined

$$\text{Tr}_E (S_E^{\dagger} d(\hat{\mathbf{p}}) S_E - d(\hat{\mathbf{p}})) = \text{Tr}_E ((S_E - I) d(\hat{\mathbf{p}}) S_E^{\dagger}) + \text{Tr}_E (d(\hat{\mathbf{p}}) (S_E^{\dagger} - I)) = 0 \quad (4.3)$$

⁵ The latter fact has been noted in [11]. In ref. [12], the one-dimensional analogue of (3.8) has been obtained by dilation of intervals centered on an arbitrary point c .

⁶ The Larmor clock is a conceivable way of measuring directly the sojourn times by means of the precession of a spin in a weak magnetic field [13,14].

It vanishes because of the cyclicity of the trace and the unitarity of S_E . The same is true for the second term in the right hand side of (3.8) and (4.2). Hence, for any sufficiently short ranged potential, spherically symmetric or not, $\text{Tr}_{E^+} T E$ is also independent of a specification of the reference frame. A similar result holds in the classical case [16].

References

- [1] W. O. Amrein, J. M. Jauch, K. B. Sinha: “*Scattering Theory in Quantum Mechanics*”. Benjamin, Reading (1977).
- [2] Ph. A. Martin: “*Time delay of quantum scattering processes*”. Acta Phys. Austriaca, Suppl. **23**, 159–208 (1981).
- [3] Ph. A. Martin: “*On the time-delay of simple scattering systems*”. Comm. Math. Phys. **47**, 221–227 (1976).
- [4] K. Gustafson, K. B. Sinha: “*On the Eisenbud-Wigner formula for time-delay*”. Lett. Math. Phys. **4**, 381–385 (1980).
- [5] D. Bollé, F. Gesztesy, H. Grosse: “*Time-delay for long-range interactions*”. J. Math. Phys. **24**, 1529–1541 (1983).
- [6] W. O. Amrein, M. B. Cibils: “*Global and Eisenbud-Wigner time-delay in scattering theory*”. Helv. Phys. Acta **60**, 481–500 (1987).
- [7] W. O. Amrein, M. B. Cibils, K. B. Sinha: “*Configuration space properties of the S-matrix and time delay in potential scattering*”. Ann. Inst. Henri Poincaré **47**, 367–382 (1987).
- [8] A. Jensen: “*Time-delay in potential scattering theory, some geometric results*”. Comm. Math. Phys. **82**, 435–456 (1981).
- [9] X.-P. Wang: “*Time-delay operator for a class of singular potentials*”. Helv. Phys. Acta **60**, 501–509 (1987).
- [10] D. Bollé, J. D’Hondt: “*On the Hilbert-space approach to classical time-delay*”. J. Phys. A **14**, 1663–1674 (1981).
- [11] H. Narnhofer: “*Another definition for time delay*”. Phys. Rev. D **22**, 2387–2390 (1980).
- [12] W. Jaworski, D. Wardlaw: “*Time delay in tunneling: transmission and reflection time delays*”. Phys. Rev. A **37**, 2843–2854 (1988).
- [13] Ph. A. Martin, M. Sassoli de Bianchi: “*On the theory of the Larmor clock and time delay*”. J. Phys. A **25**, 3627–3647 (1992).
- [14] W. Jaworski, D. Wardlaw: “*Sojourn time, sojourn time operators, and perturbation theory for one-dimensional scattering by a potential barrier*”. Phys. Rev. A **40**, 6210–6218 (1989).
- [15] J. M. Jauch, B. N. Misra, K. B. Sinha: “*Time-delay in scattering processes*”. Helv. Phys. Acta **45**, 398–426 (1972).

- [16] D. Bollé, T. A. Osborn: "*Sum rules in classical scattering*". J. Math. Phys. **22**, 883–892 (1981).

III. Temps de séjour et temps de retard conditionnels

1. Introduction

Une particule classique unidimensionnelle est soit transmise soit réfléchiée par un potentiel, suivant que son énergie est au-dessus ou au-dessous de ce dernier. Comme ces deux alternatives s'excluent mutuellement, la définition d'un temps de retard associé à la transmission et à la réflexion séparément est triviale en mécanique classique. En mécanique quantique les propriétés (+) \equiv "être transmise" et (-) \equiv "être réfléchiée" sont aussi mutuellement exclusives [(+) est la propriété contraire de (-), voir section I.4] mais, contrairement au cas classique, l'énergie incidente E ne suffit plus à déterminer si la particule sera transmise ou réfléchiée¹. C'est la raison pour laquelle la définition d'un temps de retard associé à la transmission et à la réflexion séparément n'est pas immédiate en mécanique quantique. Elle demande un détour par le concept étrange de probabilité négative.

Rappelons tout d'abord que pour une particule venant de la gauche (droite), la propriété (+) [respectivement (-)] signifie "être observée loin à droite (à gauche) du potentiel quand $t \rightarrow \infty$ ". Il n'est pas difficile de montrer que c'est équivalent à la propriété "l'impulsion sortante est positive (négative)" [AJS]. On peut donc définir la probabilité de transmission (réflexion) par la valeur moyenne

$$\mathcal{P}_{\varphi_+}(\pm) = \langle \varphi_+ | P_{\pm}^0 \varphi_+ \rangle \quad (1.1)$$

du projecteur $P_{\pm}^0 = |\pm\rangle\langle\pm|$ sur l'état sortant φ_+ . De manière équivalente, comme $\varphi_+ = S\varphi_-$, on peut définir cette même probabilité par la moyenne

$$\mathcal{P}_{\varphi_-}(\pm) = \langle \varphi_- | S^\dagger P_{\pm}^0 S \varphi_- \rangle \quad (1.2)$$

¹ Exception faite, bien entendu, pour le cas exceptionnel d'une résonance $|T_{E_r}| = 1$.

du projecteur $S^\dagger P_\pm^0 S$ sur l'état entrant φ_- . Une troisième possibilité est celle de tester la propriété d'être transmise ou réfléchié directement sur l'état de diffusion $\psi_t = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\Omega_-\varphi_-$ au temps t . Dans ce cas, c'est le projecteur

$$P_\pm = \Omega_+ P_\pm^0 \Omega_+^\dagger. \quad (1.3)$$

qu'il faut utiliser. En effet ($\varphi_- \equiv \varphi$ dans la suite)

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\psi_t}(\pm) &= \langle \psi_t | P_\pm \psi_t \rangle \\ &= \langle \varphi | e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} S^\dagger P_\pm^0 S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \varphi \rangle \\ &= \langle \varphi | S^\dagger P_\pm^0 S \varphi \rangle, \end{aligned} \quad (1.4)$$

où pour la deuxième égalité nous avons utilisé l'entrelacement $H\Omega_- = \Omega_-H_0$ et $S = \Omega_+^\dagger\Omega_-$, et pour la dernière égalité le fait que S et P_\pm^0 commutent avec H_0 .

D'autre part, on a vu que pour définir le temps de retard il fallait passer par le concept de temps de séjour. Il est donc naturel (d'essayer) de définir un temps de retard conditionnel, pour une certaine condition d'observation de la particule diffusée (ici transmise ou réfléchié), à l'aide d'une notion de temps de séjour conditionnel. Rappelons que le temps de séjour global (sans conditions d'observation sur la particule diffusée) est construit à partir de la probabilité $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r) = \langle \psi_t | P_r \psi_t \rangle$ de trouver la particule diffusée, au temps t , dans la région b_r , donnée par la valeur moyenne du projecteur P_r sur l'état de diffusion ψ_t au temps t . Pour construire un temps de séjour conditionnel il faut donc remplacer une telle probabilité par la probabilité conditionnelle

$$\mathcal{P}_{\psi_t}[b_r/(\pm)] = \frac{\mathcal{P}_{\psi_t}[b_r(\pm)]}{\mathcal{P}_{\psi_t}(\pm)} \quad (1.5)$$

d'observer la particule dans b_r , au temps t , sachant qu'elle sera finalement transmise (réfléchié). Pour cela, il faut être en mesure de donner un sens à la probabilité jointe $\mathcal{P}_{\psi_t}[b_r(\pm)]$. Une telle probabilité correspond à la mesure simultanée des deux propriétés b_r et (\pm) , associées respectivement aux deux projecteurs P_r et P_\pm . Malheureusement, il se trouve que ces deux propriétés sont incompatibles, c'est à dire qu'en général

$$[P_r, P_\pm] \neq 0, \quad (1.6)$$

et nous savons que pour deux propriétés a et b incompatibles, il n'existe pas de loi jointe $0 \leq \mathcal{P}_\psi(ab) \leq 1$ obéissant au théorème des probabilités totales²

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\psi(ab) + \mathcal{P}_\psi(a\bar{b}) &= \mathcal{P}_\psi(a), \\ \mathcal{P}_\psi(ab) + \mathcal{P}_\psi(\bar{a}b) &= \mathcal{P}_\psi(b). \end{aligned} \quad (1.7)$$

² L'ensemble des opérateurs autoadjoints sur un espace de Hilbert \mathcal{H} n'est pas une algèbre, d'où l'impossibilité de construire une structure probabilisée (voir la discussion de la section I.4).

Il en résulte qu'il n'est pas possible de donner un sens précis à un temps de séjour conditionnel en mécanique quantique, au même titre qu'il n'est pas possible de dire par quel trou est passée la particule dans la célèbre expérience des feintes de Young. Faut-il pour autant renoncer à un concept de temps de retard conditionnel? Nous allons voir que non.

Par la règle habituelle de symétrisation de tout produit d'observables incompatibles, on peut définir l'opérateur autoadjoint

$$\frac{1}{2}(P_a P_b + P_b P_a), \quad (1.8)$$

dont la valeur moyenne

$$\tilde{\mathcal{P}}_\psi(ab) = \text{Re} \langle \psi | P_a P_b \psi \rangle \quad (1.9)$$

vérifie les bonnes relations (1.7), propres à une probabilité jointe de a et b . Le prix à payer est que maintenant P_{ab} n'est plus un opérateur positif, et (1.9) peut prendre aussi des valeurs négatives³. On peut cependant adopter le point de vue qui consiste à considérer la pseudo-probabilité jointe

$$\tilde{\mathcal{P}}_{\psi_t}[b_r(\pm)] = \text{Re} \langle \psi_t | P_\pm P_r \psi_t \rangle \quad (1.10)$$

comme une quantité auxiliaire, utile dans un calcul intermédiaire. L'idée est que quand $r \rightarrow \infty$, $P_r \rightarrow I$ et $[P_r, P_\pm] \rightarrow 0$. Dans cette limite les deux propriétés b_r et (\pm) redeviennent compatibles et la pseudo-probabilité jointe $\tilde{\mathcal{P}}_{\psi_t}[b_r(\pm)] \rightarrow P_\varphi(\pm) \geq 0$ retrouve une interprétation appropriée. Donc, si on garde à l'esprit qu'à la fin du calcul on prendra la limite $r \rightarrow \infty$, on peut définir le temps de séjour conditionnel

$$\tilde{T}_\varphi[b_r/(\pm)] = \text{Re} T_\varphi^c[b_r/(\pm)], \quad (1.11)$$

comme la partie réelle du "temps complexe"

$$T_\varphi^c[b_r/(\pm)] = \frac{1}{\mathcal{P}_\varphi(\pm)} \int dt \langle \psi_t | P_\pm P_r \psi_t \rangle. \quad (1.12)$$

³ Il ne s'agit là que d'une manifestation de ce qu'on appelle parfois le préjugé classique, qui consiste à penser que tout résultat d'expérience (quel qu'il soit ce résultat) doit être certain a priori [P]. Comme ce préjugé est faux, si l'on cherche malgré tout à décrire un système physique sans l'abandonner, on est inévitablement confrontés à des situations paradoxales. Par exemple, si dans l'expérience des feintes de Young on prétend que la particule doit passer soit par un trou, soit par l'autre (le préjugé), le prix à payer est de devoir étendre le concept de localité pour admettre aussi celui, bien plus étrange, d'ubiquité. De manière analogue, si l'on veut à tout prix décrire le monde microscopique par une théorie purement statistique, le prix à payer est celui de devoir étendre le concept de probabilité pour en admettre aussi, par exemple, des négatives.

Moyennant un choix judicieux pour le temps de référence libre, il devient alors possible de faire sens d'un concept de temps de retard conditionnel en mécanique quantique. Nous verrons dans l'article qui suit que ce dernier, quand il existe, est donné par la formule (ici pour le cas de la transmission et de la réflexion)

$$\tau_{\varphi}^{\pm} = \text{Re} \frac{\langle \varphi | S^{\dagger} P_{\pm}^0 [T_0, S] \varphi \rangle}{\langle \varphi | S^{\dagger} P_{\pm}^0 S \varphi \rangle} \quad (1.13)$$

ou, plus explicitement, par exemple pour le cas de la transmission,

$$\tau_{\varphi}^{\pm} = \hbar \frac{\int_0^{\infty} dE |T_E \varphi(E)|^2 \partial_E \alpha_E^T}{\int_0^{\infty} dE |T_E \varphi(E)|^2}. \quad (1.14)$$

Le problème de la définition d'un temps de séjour associé à la transmission a fait couler beaucoup d'encre ces quinze dernières années (voir par exemple les articles de revue [H],[CLB],[HS],[LM],[BSM],[SC]), et est mieux connu dans la littérature sous le nom de "tunneling time problem". La discussion qui précède nous montre que ce problème est relié à celui plus fondamental de la signification physique d'une mesure jointe de deux observables incompatibles. Une telle question ne peut trouver de réponse, bien entendu, dans le stricte cadre de la théorie standard de la mesure de von Neumann [N]. Une théorie récente des "mesures faibles" ("weak measurements"), développée par Ahronov et Vaidman [AV], semble cependant apporter une réponse. Sans entrer dans les détails disons seulement que dans ce cadre on montre que c'est seulement la partie réelle du temps complexe (1.12) qui contient une information sur le temps passé par la particule transmise (réfléchi) dans b_r . La partie imaginaire serait quant à elle liée à l'effet de rétroaction de l'appareil de mesure sur la particule. Cet effet, sensible au choix de l'état initial de l'appareil, disparaît dans la limite de ce que Ahronov et Vaidman appellent une mesure faible [S].

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

M. Sassoli de Bianchi, *Conditional time-delay in scattering theory*, *Helv. Phys. Acta* **66**, 1993, pp. 361-377.

Conditional time delay in scattering theory

M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. We give a general and mathematically precise definition of the notion of conditional time delay in scattering theory i.e., a notion of time delay for a given condition of observation of the scattered particle. A formula, generalizing the Eisenbud-Wigner time delay formula, is derived. The basic concept entering in the definition of the conditional time delay is that of conditional sojourn time. Although conditional sojourn times cannot be uniquely defined in quantum mechanics because of the uncertainty principle, we show that conditional time delays admit a well defined probabilistic interpretation in the limit of infinitely extended spatial regions. Some comments are presented in relation with the tunneling time problem.

1. Introduction

The concept of sojourn time has been successfully applied in non relativistic quantum scattering theory to give a general, physically transparent and mathematically precise definition of the global time delay and to study its relation to the energy derivative of phase shifts. More precisely, if ψ_t denotes the (normalized and square integrable) wave function at time t of a scattering state which is asymptotic to a free evolving state φ_t in the remote past ($\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\psi_t - \varphi_t\| = 0$ in the Hilbert space norm as $t \rightarrow -\infty$), then the real number ($\varphi \equiv \varphi_{t=0}$)

$$T(B_r, \varphi) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \|F_{B_r} \psi_t\|^2 \quad (1.1)$$

where F_{B_r} denotes the projection operator onto the set of states localized in the ball B_r of radius r , centered at the origin in configuration space, may be interpreted as the average total time spent by this state, during its complete evolution, inside the ball B_r and is usually called the sojourn time (or transit, or residence, or dwell time) of ψ_t in B_r (see the review paper [1]). In a similar way, one introduces for comparison the free sojourn time

$$T_{\text{in}}^0(B_r, \varphi) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \|F_{B_r} \varphi_t\|^2 \quad (1.2)$$

associated to the (free evolving) incoming asymptotic state φ_t . The difference between these two quantities represents then the time delay

$$\tau(B_r, \varphi) \equiv T(B_r, \varphi) - T_{\text{in}}^0(B_r, \varphi) \quad (1.3)$$

for the ball B_r and for a scattering initiated in the state φ . The time delay for the initial state φ is defined as the limit of $\tau(B_r, \varphi)$ as $r \rightarrow \infty$ ¹. We write for it

$$\tau(\varphi) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} \tau(B_r, \varphi). \quad (1.4)$$

A large literature is devoted to the proof of the existence of the limit (1.4) and its identity to the Eisenbud-Wigner time delay formula ([1],[3]-[11])

$$\tau_{\text{E-W}}(\varphi) \equiv (\varphi, \tau_{\text{E-W}}\varphi) \quad (1.5)$$

where $\tau_{\text{E-W}}$ is the Eisenbud-Wigner time delay operator with energy shell components

$$\tau_{\text{E-W}}(E) \equiv -iS^\dagger(E) \frac{\partial S(E)}{\partial E} \quad (1.6)$$

and $S(E)$ is the scattering operator at energy E , acting on square integrable wave functions of the angular variables in momentum space. Formula (1.5),(1.6) generalize the classical formula of Eisenbud and Wigner asserting that, for scattering by a spherically symmetric potential in a given partial wave subspace, the time delay is expressed by the derivative of the phase shift with respect to energy (see [12],[13] but also [1]).

However, the time delay (1.3),(1.4) is a global quantity. Indeed, its calculation involves the scattered wave in all directions i.e., with no specification of the conditions of observation of the scattered particle. Another possibility is to introduce a notion of time delay more appropriate for scattering observed by counters in a differential cross-section measurement i.e., a notion of time delay from a given direction into a given direction of observation of the scattered particle, namely an angular time delay. The idea for this type of time delay apparently was present in the original work of Eisenbud and Wigner [12],[13] and has since been studied by number of authors (see [14] and references therein). Under certain circumstances it has been found that the angular time delay $\tau_E(\hat{k}_1, \hat{k}_2)$ for an initial direction \hat{k}_1 and a final direction \hat{k}_2 (at fixed energy E) is given by the derivative of the argument of the corresponding S-matrix element

$$\tau_E(\hat{k}_1, \hat{k}_2) = \frac{d}{dE} \arg(\hat{k}_2 | S(E) | \hat{k}_1). \quad (1.7)$$

However, unlike the global time delay, the angular time delay has not received until now a general and mathematically precise definition.

The main purpose of the present paper is to provide a general, mathematically precise and physically transparent definition of the concept of conditional time delay $\tau^F(\varphi)$ i.e.,

¹ The limit (1.4) for the time delay can exist, in general, only for sequences of dilated balls. If the limit exists, it also depends on the arbitrary choice of the dilation center of the balls [2]. Throughout all this paper we shall only consider, for simplicity, balls centered at the origin.

the time delay corresponding to an initial state φ and for a scattered state which is ultimately observed in some arbitrary subspace of the space of scattering states, specified by the range of a given projection operator F . For instance, if F is the projection operator onto the subspace of states with momentum lying in the cone $C(\hat{k}_2, \alpha) \equiv \{\vec{k} \in \mathbb{R}^3 | \vec{k} \cdot \hat{k}_2 \geq \alpha|\vec{k}|\}$, where $|\hat{k}_2| = 1$ and $0 < \alpha \leq 1$, then (according to Dollard's scattering into cones [15]) $\tau^F(\varphi)$ will be the time delay for an initial state φ and for a scattering state found in the cone $C(\hat{k}_2, \alpha)$ in configuration space as $t \rightarrow \infty$. Passing then to the limit of an incoming plane wave with direction \hat{k}_1 and of a cone of vanishing apex-angle (i.e., $\alpha \rightarrow 1$), we recover in section 4 the angular time delay (1.7).

The basic concept entering in the definition of the global time delay is that of sojourn time. In the same way, we shall see that the basic concept entering in the definition of the conditional time delay is that of conditional sojourn time i.e., a concept of sojourn time conditional to a given observation of the scattered particle. To do this we shall proceed as follows. In section 2 we consider the one-dimensional motion of a classical scattering particle with initial conditions distributed by some probability law in phase space. In this particular context, we shall define the average sojourn times for transmitted and reflected trajectories separately. Transmission and reflection time delays will then be defined with respect to suitable choices of the free reference times. This section should be considered as a preparative for section 3 where we construct the quantum transmission and reflection sojourn times as the natural quantum analogues of the corresponding classical quantities. The main conceptual difficulty that we shall encounter in this generalization is related to the non-existence, in quantum mechanics, of analogues of classical objects such as joint probability distributions (and thus conditional probabilities) for non commuting observables. As a consequence, due to Heisenberg's uncertainty principle, conditional sojourn times with a proper probabilistic interpretation cannot be defined, in general, in quantum mechanics. However, this difficulty will not play a crucial role as long as one is interested in the time delay limit. Some comments will be presented in relation with the tunneling time controversy. Section 4 is devoted to the natural generalization of the results of section 3 to the case of a three-dimensional scattering and for more general conditions of observation of the scattering particle. A formula, generalizing the Eisenbud-Wigner time delay formula (1.5),(1.6), will be derived. Under suitable assumptions it will be shown that this formula specializes to the angular time delay formula (1.7).

2. One-dimensional classical scattering

We consider in this section the simple system constituted by a one-dimensional classical particle of mass m moving in an external conservative force field $F(x) = -dV(x)/dx$. We shall assume for simplicity that the force has a finite range (x_1, x_2) (i.e., $V(x) = 0$ for $x \leq x_1$ and $x \geq x_2$). The states of such a single particle system are points $(x, p) \in \mathbb{R}^2$ representing the position and the momentum of the particle. The free and interacting

dynamical transformations are given by

$$\begin{aligned}\Phi_t^0 &: (x, p) \longmapsto (x + pt, p) \\ \Phi_t &: (x, p) \longmapsto (x(t), p(t))\end{aligned}\tag{2.1}$$

where $p(t) = m dx(t)/dt$ and $x(t)$ is the unique solution of the equation $m d^2 x(t)/dt^2 = F(x(t))$ with initial conditions $x(0) = x$ and $dx/dt(0) = p/m$ [16]. In the usual way, we define the "Möller transformations"

$$\Omega_{\pm} \equiv \lim_{t \rightarrow \pm\infty} \Phi_{-t} \circ \Phi_t^0\tag{2.2}$$

and the scattering transformation

$$S \equiv \Omega_+^{-1} \circ \Omega_-\tag{2.3}$$

where \circ denotes compositions of maps and we assume asymptotic completeness [16]. An important property of the scattering transformation (2.3) is that it commutes with the free evolution i.e.,

$$S \circ \Phi_t^0 = \Phi_t^0 \circ S.\tag{2.4}$$

Let us now suppose that we have an ensemble of initial conditions $(x_0, p_0) \in \mathbb{R}^2$, at time $t = 0$, described by a probability distribution f such that $\int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 f(x_0, p_0) = 1$. We also assume that the particles come from the left i.e., $f(x_0, p_0) = 0$ for all $x_0 \in \mathbb{R}$ if $p_0 \leq 0$. The scattering state at time t , associated with the initial condition (x_0, p_0) , is $\Phi_t \circ \Omega_-(x_0, p_0)$. Thus, the probability $P_t(\Sigma, f)$ of finding, at time t , a particle in a volume $\Sigma \subset \mathbb{R}^2$ in phase space is given by

$$P_t(\Sigma, f) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 X_{\Sigma} \circ \Phi_t \circ \Omega_-(x_0, p_0) f(x_0, p_0)\tag{2.5}$$

where X_{Σ} is the characteristic function of the volume Σ ($X_{\Sigma}(x, p) = 1$ if $(x, p) \in \Sigma$ and $X_{\Sigma}(x, p) = 0$ otherwise). Making the change of variables $(x, p) = \Phi_t \circ \Omega_-(x_0, p_0)$ and using the well known fact that the transformations (2.1)-(2.3) are measure preserving [16], the probability (2.5) may be rewritten into the form

$$P_t(\Sigma, f) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp X_{\Sigma}(x, p) f_t(x, p) \equiv \langle X_{\Sigma} \rangle_{f_t}\tag{2.6}$$

where $f_t(x, p) \equiv f \circ \Omega_-^{-1} \circ \Phi_{-t}(x, p)$ is the probability (distribution) of finding a particle, at time t , with position x and momentum p . Let now X_{B_r} be the characteristic function of $\{x | x \in (-r, r)\} \times \mathbb{R}$ where $(-r, r)$ is a finite interval containing the support of the potential. Then, $P_t(B_r, f) = \langle X_{B_r} \rangle_{f_t}$ is the probability of finding, at time t , a particle in the interval $(-r, r)$. The average time spent in $(-r, r)$ during a complete evolution, for the initial distribution f , may then be defined as the integral

$$T(B_r, f) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt P_t(B_r, f).\tag{2.7}$$

In the same way, we define the free reference average time $T_{\text{in}}^0(B_r, f)$ associated with the (free evolving) incoming asymptotic states $\Phi_t^0(x_0, p_0)$ by

$$T_{\text{in}}^0(B_r, f) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt P_{\text{in},t}^0(B_r, f) \quad (2.8)$$

where $P_{\text{in},t}^0(B_r, f) = \langle X_{B_r} \rangle_{f_t^0}$ and $f_t^0 \equiv f \circ \Phi_{-t}^0$. The average global time delay, for the initial distribution f , may then be defined as the limit

$$\tau(f) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} [T(B_r, f) - T_{\text{in}}^0(B_r, f)]. \quad (2.9)$$

However, since the scattering states $\Phi_t \circ \Omega_{-}(x_0, p_0)$ are as closely associated with the outgoing asymptotic states $\Phi_t^0 \circ S(x_0, p_0)$ as they are with the incoming ones, an equally reasonable definition for the time delay is

$$\tau(f) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} [T(B_r, f) - T_{\text{out}}^0(B_r, f)] \quad (2.10)$$

where $T_{\text{out}}^0(B_r, f)$ is the free reference average time associated with the outgoing asymptotic states $\Phi_t^0 \circ S(x_0, p_0)$ i.e.,

$$T_{\text{out}}^0(B_r, f) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt P_{\text{out},t}^0(B_r, f) \quad (2.11)$$

with

$$\begin{aligned} P_{\text{out},t}^0(B_r, f) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 X_{B_r} \circ \Phi_t^0 \circ S(x_0, p_0) f(x_0, p_0) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp X_{B_r}(x, p) f_t^0 \circ S^{-1}(x, p) = \langle X_{B_r} \rangle_{f_t^0 \circ S^{-1}} \end{aligned} \quad (2.12)$$

where for the second equality in (2.12) we have made the change of variables $(x, p) = \Phi_t^0 \circ S(x_0, p_0)$. However, since the scattering transformation is energy conserving, we have²

$$T_{\text{in}}^0(B_r, f) = T_{\text{out}}^0(B_r, f). \quad (2.13)$$

In other terms, the free reference average time is independent of the choice of incoming or outgoing asymptotic states and the definitions (2.9) and (2.10) are in fact equivalents.

A scattering particle coming from the left is transmitted (alternatively, reflected) if its outgoing momentum is positive (alternatively, negative). Thus, the transmission (+) and reflection (-) probabilities $P^{\pm}(f)$, for the initial distribution f , are given by

$$\begin{aligned} P^{\pm}(f) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 X^{\pm} \circ S(x_0, p_0) f(x_0, p_0) \\ &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_{-\infty}^{\infty} dp_0 f^{\pm}(x_0, p_0) \end{aligned} \quad (2.14)$$

² In more than one dimension the equality (2.13) still holds for spherically symmetric potentials and in general it is to be replaced by $T_{\text{in}}^0(B_r, f) = T_{\text{out}}^0(B_r, f) + O(r^{-1})$; see for instance [10].

where $X^\pm(x, p) \equiv \Theta(\pm p)$ and Θ is the usual Heaviside step function. In view of defining the average time spent in $(-r, r)$, conditional to the fact that the particles are ultimately transmitted (alternatively, reflected), we consider the characteristic functions

$$\begin{aligned} X_{\text{out}}^\pm &\equiv X^\pm \circ S \circ \Omega_-^{-1} \circ \Phi_{-t} \\ &= X^\pm \circ \Omega_+^{-1} \end{aligned} \quad (2.15)$$

and we observe that

$$\langle X_{\text{out}}^\pm \rangle_{f_t} = P^\pm(f). \quad (2.16)$$

For the second equality in (2.15) we have used (2.3),(2.4), the intertwining property $\Omega_\pm \circ \Phi_t^0 = \Phi_t \circ \Omega_\pm$, and the fact that $X^\pm \circ \Phi_t^0 = X^\pm$. The conditional probabilities $P_t(B_r|\pm, f)$ of finding a particle in $(-r, r)$ at time t , knowing that the particles will be ultimately transmitted (alternatively, reflected) are then given by

$$P_t(B_r|\pm, f) = \frac{\langle X_{\text{out}}^\pm X_r \rangle_{f_t}}{P^\pm(f)} \quad (2.17)$$

and the average sojourn times $T^\pm(B_r, f)$ in $(-r, r)$, associated to the initial distribution f , for transmitted (alternatively, reflected) particles may be defined as the integral

$$T^\pm(B_r, f) = \int_{-\infty}^{\infty} dt P_t(B_r|\pm, f). \quad (2.18)$$

Clearly, for the conditional sojourn times (2.18) we have the conditional average

$$T(B_r, f) = P^+(f)T^+(B_r, f) + P^-(f)T^-(B_r, f). \quad (2.19)$$

since $X^+ + X^- = I$. The next step is to define, for comparison, free sojourn times associated with the outgoing asymptotic states, for transmitted and reflected particles separately³. For this, we notice that for a free evolution X_{out}^\pm is simply to be replaced by X^\pm and we have $\langle X^\pm \rangle_{f_t^0 \circ S^{-1}} = P^\pm(f)$. The average free reference sojourn times for transmitted (alternatively, reflected) particles are then given by

$$T_{\text{out}}^{0,\pm}(B_r, f) = \int_{-\infty}^{\infty} dt P_{\text{out},t}^0(B_r|\pm, f) \quad (2.20)$$

where $P_{\text{out},t}^0(B_r|\pm, f) = \langle X^\pm X_{B_r} \rangle_{f_t^0 \circ S^{-1}} / P^\pm(f)$. The time delays $\tau^\pm(f)$, for the initial distribution f , conditional to the fact that the particles are transmitted (alternatively, reflected), may then be defined as the limit

$$\tau^\pm(f) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} \left(T^\pm(B_r, f) - T_{\text{out}}^{0,\pm}(B_r, f) \right) \quad (2.21)$$

³ It is worth noting that, contrary to the case of the global time delay (2.9),(2.10), the choice of outgoing asymptotic states (instead of incoming ones) in the definition of free reference times for transmitted and reflected particles separately is necessary in order to correctly subtract the linear divergence in (2.18), as $r \rightarrow \infty$ (see the explicit calculation in appendix A).

and the global (unconditional) time delay (2.9),(2.10) is given by

$$\tau(f) = P^+(f)\tau^+(f) + P^-(f)\tau^-(f). \quad (2.22)$$

An explicit calculation yields (see appendix A)

$$\tau^\pm(f) = P^\pm(f)^{-1} \int_0^\infty dE f^\pm(E) \frac{d\alpha_d^\pm(E)}{dE}. \quad (2.23)$$

where $E = p_0^2/2m$, $f^\pm(E) \equiv \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\infty}^\infty dx_0 f^\pm(x_0, \sqrt{2mE})$ and $\alpha_d^\pm(E)$ are the generators of the scattering transformation (2.3), corresponding to the so-called quasiclassical approximations for the quantum-mechanical phase shifts (see [17] and references therein).

3. One-dimensional quantum scattering

We consider in this section the quantum-mechanical generalization of the classical description presented in section 2. Let $U_t^0 = \exp(-iH_0t)$ and $U_t = \exp(-iHt)$ be the free and total evolution on the Hilbert space $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R})$ of quantum states, with self-adjoint generators $H_0 = -(1/2m)d^2/dx^2$ and $H = -(1/2m)d^2/dx^2 + V(x)$ being respectively the free and total Hamiltonian (m is the mass of the particle and we have set $\hbar = 1$). The potential V is such that the wave operators $\Omega_\pm \equiv s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} U_{\pm t}^\dagger U_\pm^0$ exist and are complete and the scattering operator $S \equiv \Omega_+^\dagger \Omega_-$ is unitary [16]. For sake of simplicity we shall assume, as in section 2, that the potential has finite range (x_1, x_2) .

According to the statistical interpretation of quantum theory, the random variables of probability theory correspond to the observables of quantum theory and the probability measures to the states. The correspondence between the classical objects defined in section 2 and their quantum mechanical analogues is then given by the following dictionary

$$\begin{aligned} \langle (\cdot) \rangle_{f_t} &\longleftrightarrow (\psi_t, (\cdot) \psi_t) \\ \langle (\cdot) \rangle_{f_t^0} &\longleftrightarrow (\varphi_t, (\cdot) \varphi_t) \\ \langle (\cdot) \rangle_{f_t^0 \circ S^{-1}} &\longleftrightarrow (S\varphi_t, (\cdot) S\varphi_t) \\ X_{B_r} &\longleftrightarrow F_{B_r} \\ X_{\text{out}}^\pm &\longleftrightarrow F_{\text{out}}^\pm \equiv \Omega_+ F^\pm \Omega_+^\dagger \end{aligned} \quad (3.1)$$

where $\psi_t \equiv U_t \Omega_- \varphi$ is the scattering state at time t , for a scattering initiated in the state φ , $\varphi_t \equiv U_t^0 \varphi$ is the (free evolving) incoming asymptotic state ($\lim_{t \rightarrow -\infty} \|\psi_t - \varphi_t\| = 0$) and $S\varphi_t = U_t^0 S\varphi$ is the (free evolving) outgoing asymptotic state ($\lim_{t \rightarrow \infty} \|\psi_t - S\varphi_t\| = 0$). F_{B_r} is the projection operator onto the set of states localized in the spatial interval $(-r, r)$ and we have $(\psi_t, F_{B_r} \psi_t) = \|F_{B_r} \psi_t\|^2 \equiv P_t(B_r, \varphi)$ which is the probability of finding the particle in $(-r, r)$, at time t , for the initial state φ . The quantum analogue of (2.16) is given by

$$\begin{aligned} (\psi_t, F_{\text{out}}^\pm \psi_t) &= (\varphi, \Omega_-^\dagger U_t^\dagger F_{\text{out}}^\pm U_t \Omega_- \varphi) \\ &= (\varphi, S^\dagger F^\pm S \varphi) \\ &= \|F^\pm S \varphi\|^2 \equiv P^\pm(\varphi) \end{aligned} \quad (3.2)$$

where $F^\pm \equiv \Theta(\pm P)$ (P is the momentum operator) are the projection operators onto the set of states of positive (alternatively, negative) momentum.

We come now to the crucial point of giving the quantum analogue of the conditional probabilities (2.17). Unfortunately, contrary to the classical random variables X_{B_r} and X_{out}^\pm , the projection operators F_{B_r} and F_{out}^\pm do not commute i.e., they correspond to incompatible observables. Now, it is a well known fact that no genuine joint probabilities exist in quantum mechanics for non commuting observables. Despite this fundamental difficulty let us consider the following auxiliary function

$$W_t(B_r, \pm; \varphi) \equiv \left(\psi_t, \frac{1}{2}(F_{\text{out}}^\pm F_{B_r} + F_{B_r} F_{\text{out}}^\pm) \psi_t \right). \quad (3.3)$$

It is then an easy matter to check that (3.3) obeys to the relations we would expect from such a joint probability i.e.,

- (i) $P_t(B_r, \varphi) = W_t(B_r, +; \varphi) + W_t(B_r, -; \varphi)$,
- (ii) $P^\pm(\varphi) = W_t(B_r, \pm; \varphi) + W_t(\overline{B_r}, \pm; \varphi)$, $\overline{B_r} \equiv \mathbb{R} \setminus B_r$.

Moreover, although (3.3) does not possess a proper probabilistic interpretation as is clear from the fact that it may take negative values, in the limit $r \rightarrow \infty$, we have $s\text{-}\lim_{r \rightarrow \infty} F_{B_r} = I$ and thus

$$\lim_{r \rightarrow \infty} W_t(B_r, \pm; \varphi) = P^\pm(\varphi) \geq 0. \quad (3.4)$$

In other terms, in this limit, the observables F_{B_r} and F_{out}^\pm become compatible and (3.3) becomes non negative i.e., it recover a consistent joint probability interpretation. Thus, keeping in mind that at the end we shall consider the time delay limit $r \rightarrow \infty$, we define the natural quantum analogues (in the sense of (i),(ii)) of the classical transmission and reflection sojourn times (2.18) by

$$\begin{aligned} T^\pm(B_r, \varphi) &\equiv P^\pm(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(\psi_t, \frac{1}{2}(F_{\text{out}}^\pm F_{B_r} + F_{B_r} F_{\text{out}}^\pm) \psi_t \right) \\ &= P^\pm(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \text{Re}(\psi_t, F_{\text{out}}^\pm F_{B_r} \psi_t) \\ &= \text{Re} \left[\frac{(\varphi, S^\dagger F^\pm S T_{B_r} \varphi)}{\| F^\pm S \varphi \|^2} \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

where $T_{B_r} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt \Omega_-^\dagger U_t^\dagger F_{B_r} U_t \Omega_- = \int_{-\infty}^{\infty} dt U_t^{0\dagger} \Omega_-^\dagger F_{B_r} \Omega_- U_t^{0\dagger}$ is the sojourn time operator. Notice that, because of (i), we immediately obtain

$$T(B_r, \varphi) = P^+(\varphi) T^+(B_r, \varphi) + P^-(\varphi) T^-(B_r, \varphi) \quad (3.6)$$

where $T(B_r, \varphi) = (\varphi, T_{B_r} \varphi)$ is the global sojourn time (1.1). According to (2.20), trans-

mission (alternatively, reflection) free reference sojourn times are given by

$$\begin{aligned}
T_{\text{out}}^{0,\pm}(B_r, \varphi) &\equiv P^\pm(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \left(S\varphi_t, \frac{1}{2}(F^\pm F_{B_r} + F_{B_r} F^\pm) S\varphi_t \right) \\
&= P^\pm(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dt \operatorname{Re}(S\varphi_t, F^\pm F_{B_r} S\varphi_t) \\
&= \operatorname{Re} \left[\frac{(\varphi, S^\dagger F^\pm S (S^\dagger T_{B_r}^0 S) \varphi)}{\|F^\pm S\varphi\|^2} \right]
\end{aligned} \tag{3.7}$$

where $T_{B_r}^0 \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt U_t^{0\dagger} F_{B_r} U_t^0$ is the free sojourn time operator. Then, the time delays for the initial state φ conditional to the fact that the particle is ultimately transmitted (alternatively, reflected) may be defined as the limit

$$\tau^\pm(\varphi) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} [T^\pm(B_r, \varphi) - T_{\text{out}}^{0,\pm}(B_r, \varphi)] \tag{3.8}$$

and we have the average

$$\tau(\varphi) = P^+(\varphi)\tau^+(\varphi) + P^-(\varphi)\tau^-(\varphi) \tag{3.9}$$

where $\tau(\varphi)$ is the global time delay (1.4)⁴.

For a sufficiently well behaved incoming state φ , describing a particle approaching the potential from the left, an explicit calculation yields (see appendix B)

$$\tau^\pm(\varphi) = P^\pm(\varphi)^{-1} \int_0^\infty dE |A^\pm(E)\varphi(E)|^2 \frac{d\alpha^\pm(E)}{dE} \tag{3.10}$$

where $A^\pm(E) = |A^\pm(E)| \exp(i\alpha^\pm(E))$ are respectively the transmission and reflection coefficients at energy E .

Remarks

1) It is worth emphasizing that (3.3) is a natural choice only in view of the limit $r \rightarrow \infty$ (because of (3.4)). If r is kept finite, it may be preferable, instead of (3.3), to keep the non-negativity along with (i) and give up (ii) by considering

$$W_t(B_r, \pm; \varphi) = \|F_{\text{out}}^\pm F_{B_r} \psi_t\|^2. \tag{3.11}$$

For this choice $T^\pm(B_r, \varphi)$ is still a (real) well defined quantity though it does not have a simple expression like (3.5). Another possibility is to keep the non-negativity along with (ii) and give up (i) by considering

$$W_t(B_r, \pm; \varphi) = \|F_{B_r} F_{\text{out}}^\pm \psi_t\|^2. \tag{3.12}$$

⁴ Notice that, as for the classical case, the free sojourn times $T_{\text{in}}^0(B_r, \varphi) = (\varphi, T_{B_r}^0 \varphi)$ and $T_{\text{out}}^0(B_r, \varphi) = (\varphi, S^\dagger T_{B_r}^0 S \varphi)$ are the same for spherically symmetric potentials (see (4.5)) and in general as $r \rightarrow \infty$; see for instance [18].

This gives

$$T^\pm(B_r, \varphi) = P^\pm(\varphi)^{-1} T(B_r, S^\dagger F^\pm S \varphi) \equiv T(B_r, \varphi^\pm) \quad (3.13)$$

i.e., the global sojourn time for the normalized part $\varphi^\pm \equiv P^\pm(\varphi)^{-\frac{1}{2}} S^\dagger F^\pm S \varphi$ of the initial wave packet φ which is ultimately transmitted (alternatively reflected). This is the definition taken in [19] for transmission and reflection sojourn (dwell) times.

2) We observe that the time delay formula (3.10) is the direct quantum generalization of the classical formula (2.23) in the sense of the correspondence

$$\begin{aligned} f^\pm(E) &\longleftrightarrow |A^\pm(E)\varphi(E)|^2 \\ \alpha_{\text{cl}}^\pm(E) &\longleftrightarrow \alpha^\pm(E). \end{aligned} \quad (3.14)$$

3) In the limit of an incoming state approaching a plane wave, formula (3.10) yields the (here one-dimensional) angular time delay formula (1.7). However, (3.10) is valid for general (sufficiently well behaved) incoming states φ and in that sense it is more general than (1.7).

4) A different definition for transmission and reflection time delays, using the concept of sojourn time, has been proposed in [20]. However, contrary to our case, their approach is drastically restricted to one-dimensional scattering and yields, for these times, divergent expressions in the limit $r \rightarrow \infty$.

5) The recent controversy on tunneling times has evolved around the question of finding a well-defined and universal quantity giving the average time spent by a transmitted (alternatively, reflected) quantum (one-dimensional) particle in a finite interval containing the range of the potential (see the review papers [21],[22]). According to the present analysis, the tunneling time question may simply be restated as follows: what is the quantum analogue of the (classical) random variable $X_{\text{out}}^\pm X_{B_r}$? The question is clearly an ill-defined one since the projection operators F_{out}^\pm and F_{B_r} , which are respectively the quantum analogues of the characteristic functions X_{out}^\pm and X_{B_r} , correspond to incompatible observables (i.e., they do not commute). This simply means that conditional sojourn times cannot be uniquely defined in quantum mechanics because of the uncertainty principle. In other terms, the tunneling time question is a classical question which does not admit a general answer in the realm of quantum mechanics. However, as far as one is concerned with the notion of time delay, the situation is different. Indeed, in the limit $r \rightarrow \infty$, the observables F_{B_r} and F_{out}^\pm become compatible and the auxiliary function (3.3) recover a proper probabilistic interpretation. Thus, in agreement with the conclusions in [21], we find that conditional time delays (i.e., asymptotic phase times) are the only well-defined (in the probabilistic sense) conditional time-statements in the context of the quantum scattering process.

6) The Larmor clock, originally introduced in [23],[24], is a conceivable way of measuring directly the sojourn time by means of the precession of a spin in a weak magnetic

field (see [25] and references therein). The Larmor clock has also been used to define transmission and reflection sojourn times by considering the spin precession associated with the transmitted and reflected waves separately. It is interesting to note that the times thus obtained (the so-called local Larmor times) are nothing but the transmission and reflection sojourn times (3.5) (see for instance [26]).

7) It is worth noting that the naive correspondence $X_{\text{out}}^{\pm} X_{B_r} \longleftrightarrow F_{\text{out}}^{\pm} F_{B_r}$ leads to the so-called complex interaction times which have received a formulation in terms of Feynman path-integrals [27]-[29] (in [29] the authors give the same negative conclusion about the possibility of obtaining a unique quantum definition for the duration of a tunneling event). The imaginary parts of these times, the so-called Büttiker Larmor times [30], contain an information on the variation of transmission and reflection probabilities with respect to energy and in the context of the Larmor clock method they are related to the change of the spin component parallel to the field direction when transmitted and reflected particles are considered separately.

4. Three-dimensional quantum scattering

We consider in this section a (one-body) potential scattering system in three dimensions. The Hilbert space is $\mathcal{H} \equiv L^2(\mathbb{R}^3)$ and the free hamiltonian is $H_0 = -\Delta/2m$ ($\hbar = 1$ and m is the mass of the particle) where Δ denotes the Laplacian on $L^2(\mathbb{R}^3)$. The total hamiltonian is $H = H_0 + V$ where the potential V is assumed to be such that the wave operators exist, are complete and the scattering operator is unitary [16].

Let F be an arbitrary projection operator in \mathcal{H} . Then, according to the analysis of the preceding sections, we define the time delay $\tau^F(\varphi)$ of the scattering process with incoming state φ and for a scattered state which is observed in the subspace $F\mathcal{H}$, as the limit

$$\tau^F(\varphi) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} [T^F(B_r, \varphi) - T_{\text{out}}^{0,F}(B_r, \varphi)] \quad (4.1)$$

where (see (3.5),(3.7))

$$\begin{aligned} T^F(B_r, \varphi) &\equiv \text{Re} \left[\frac{(\varphi, S^\dagger F S T_{B_r} \varphi)}{\|FS\varphi\|^2} \right], \\ T_{\text{out}}^{0,F}(B_r, \varphi) &\equiv \text{Re} \left[\frac{(\varphi, S^\dagger F S (S^\dagger T_{B_r}^0 S) \varphi)}{\|FS\varphi\|^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

For simplicity, we shall study the limit (4.1) in the simple case of a finite-range spherically symmetric potential ($R > 0$, $V(r) = 0$ if $r \geq R$) and for an incoming state φ belonging to the dense set of states of Schwartz functions with compact support on the spectrum of H_0 and having a finite number of components in the basis $|\ell, m\rangle$ of eigenvectors of the orbital momentum. Then, the sojourn time $T_{B_r}(E)$, at energy E , admits the following decomposition

$$T_{B_r}(E) = \sum_{\substack{\ell=0 \\ |m| \leq \ell}}^{\infty} |\ell, m\rangle T_{B_r}^\ell(E) \langle \ell, m| \quad (4.3)$$

where, for $r \geq R$ (see for instance [1]),

$$T_{B_r}^\ell(E) = \frac{2rm}{\sqrt{2mE}} - iS_\ell^*(E)\frac{dS_\ell(E)}{dE} - \frac{1}{2E} \sin(2\sqrt{2mE}r - \ell\pi + 2\delta_\ell(E)) + O(r^{-1}) \quad (4.4)$$

and $\delta_\ell(E)$ is the phase shift for the energy E and the angular momentum ℓ i.e., $S_\ell(E) \equiv (\ell, m|S(E)|\ell, m) = \exp(2i\delta_\ell(E))$. For the free sojourn time we have obviously the same expression with

$$\begin{aligned} T_{B_r}^{0,\ell}(E) &\equiv (\ell, m|T_r^0(E)|\ell, m) \\ &= (\ell, m|S^\dagger(E)T_r^0(E)S(E)|\ell, m) \\ &= \frac{2rm}{\sqrt{2mE}} - \frac{1}{2E} \sin(2\sqrt{2mE}r - \ell\pi) + O(r^{-1}). \end{aligned} \quad (4.5)$$

We shall now assume that the projection operator F is, in momentum space, multiplication by a function of the angles only. Then, the difference $T_{B_r}^\ell(E) - T_{B_r}^{0,\ell}(E)$ is to be averaged between the smooth wave packets $\varphi_{\ell,m}(E)$ and $(S^\dagger F S \varphi)_{\ell,m}(E)$ and thus converges weakly, as $r \rightarrow \infty$, to $-iS_\ell^*(E)dS_\ell(E)/dE = 2d\delta_\ell(E)/dE$ since the oscillating terms in (4.4) and (4.5) do not contribute because of the Riemann-Lebesgue lemma. Finally, using $SS^\dagger = I$ (or equivalently $S_\ell(E)S_\ell^*(E) = 1$), we obtain for the conditional time delay the formula

$$\tau^F(\varphi) = \text{Re} \left[\frac{(\varphi, S^\dagger F (-idS/dH_0)\varphi)}{\|FS\varphi\|^2} \right]. \quad (4.6)$$

The proof of the existence of the limit (4.1) and its identity to the formula (4.6) could be extended to the case of more general potentials (not necessarily spherically symmetric) for a suitable class of initial states φ , by the time-dependent methods of [6]. Formula (4.6) is the natural generalization of the Eisenbud-Wigner formula (1.5),(1.6) which is simply recovered by setting $F = I$. It also constitute, as we shall see, the natural generalization of the angular time delay formula (1.7). For this, let F be the projection operator onto the subspace of states the momentum of which lies in the cone $C(\hat{k}_2, \alpha) \equiv \{\vec{k} \in \mathbb{R}^3 | \vec{k} \cdot \hat{k}_2 \geq \alpha|\vec{k}|\}$ ($|\hat{k}_2| = 1$ and $0 < \alpha \leq 1$) and let $\Omega(\hat{k}_2, \alpha)$ be the part of the surface of the unit sphere $S^{(2)}$ lying in the cone $C(\hat{k}_2, \alpha)$. Clearly $F = \int_{\Omega(\hat{k}_2, \alpha)} d^2k |\hat{k}\rangle\langle \hat{k}|$. To derive the angular time delay formula (1.7) from (4.6) we need to make the two following assumptions:

- (i) the modulus of the incoming wave packet φ is sharply peaked in momentum space about $\vec{k}_1 = \sqrt{2mE}\hat{k}_1$;
- (ii) relative to this sharp peak the S -matrix and its energy derivative are slowly varying functions with respect to all variables (energy and angles).

Then, we have the approximations

$$(S\varphi)(E, \hat{k}) = \int_{S^{(2)}} d^2k' (\hat{k}|S(E)|\hat{k}')\varphi(E, \hat{k}') \approx A(E)(\hat{k}|S(E)|\hat{k}_1) \quad (4.7)$$

where $A(E) \equiv \int_{S^{(2)}} d^2 k' \varphi(E, \hat{k}')$. Thus, we obtain

$$\begin{aligned} \|FS\varphi\|^2 &= \int_0^\infty dE' \int_{\Omega(\hat{k}_2, \alpha)} d^2 k |(S\varphi)(E', \hat{k})|^2 \\ &\approx \int_0^\infty dE' \int_{\Omega(\hat{k}_2, \alpha)} d^2 k |A(E')|^2 |(\hat{k}|S(E')|\hat{k}_1)|^2 \\ &\approx \int_0^\infty dE' |A(E')|^2 \int_{\Omega(\hat{k}_2, \alpha)} d^2 k |(\hat{k}|S(E)|\hat{k}_1)|^2 \end{aligned} \quad (4.8)$$

and in an analogous way one finds

$$(\varphi, S^\dagger F(-idS/dH_0)\varphi) \approx \int_0^\infty dE' |A(E')|^2 \int_{\Omega(\hat{k}_2, \alpha)} d^2 k (\hat{k}_1|S^\dagger(E)|\hat{k})(\hat{k} - idS(E)/dE|\hat{k}_1). \quad (4.9)$$

Finally, inserting (4.8) and (4.9) into (4.6) and taking the limit $\alpha \rightarrow 1$, we obtain

$$\tau^F(\varphi) \approx \text{Re} \left[-i \frac{(\hat{k}_2|dS(E)/dE|\hat{k}_1)}{(\hat{k}_2|S(E)|\hat{k}_1)} \right] = \frac{d}{dE} \arg(\hat{k}_2|S(E)|\hat{k}_1) \quad (4.10)$$

which is the desired angular time delay formula (1.7).

To conclude, consider the case where F is the projection operator onto the one-dimensional subspace generated by a (sufficiently smooth in energy) state ξ i.e., $F = |\xi\rangle\langle\xi|$. Then, we come down to a notion of state-to-state time delay i.e., the time delay associated to the transition $\varphi \rightarrow \xi$. We have the formula

$$\tau^F(\varphi) = \text{Re} \left[-i \frac{(\xi, (dS/dH_0)\varphi)}{(\xi, S\varphi)} \right]. \quad (4.11)$$

Acknowledgments

I am grateful to Ph. A. Martin and M. B. Cibils for useful discussions and for their critical reading of the manuscript.

Appendix A

In this appendix we derive explicit expressions for the transmission and reflection time delays (2.21). We shall do it in some details only for the transmitted case. Let $(x_-(t), p_-(t)) \equiv \Phi_t \circ \Omega_-(x_0, p_0)$, we have

$$\begin{aligned} T^+(B_r, f) &= \int_{-\infty}^\infty dt P_t(B_r|+, \varphi) \\ &= P^+(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^\infty dt \int_{-\infty}^\infty dx \int_{-\infty}^\infty dp X_t^+(x, p) X_{B_r}(x, p) f_t(x, p) \\ &= P^+(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^\infty dt \int_{-\infty}^\infty dx_0 \int_{-\infty}^\infty dp_0 X_{B_r}(x_-(t), p_-(t)) f^+(x_0, p_0) \\ &= P^+(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^\infty dt \int_{-\infty}^\infty dx_0 \int_{-\infty}^\infty dp_0 \int_{-\tau}^r dy \delta(y - x_-(t)) f^+(x_0, p_0) \end{aligned} \quad (A.1)$$

where for the third equality we have made the change of variables $(x, p) = \Phi_t \circ \Omega_-(x_0, p_0)$ and δ is the Dirac delta-function. At this step we note that for a transmitted trajectory

$$p_-(t) = \sqrt{p_0^2 - 2mV(x_-(t))}. \quad (\text{A.2})$$

Thus, making the change of variable $z = x_-(t)$, $dt = (m/\sqrt{p_0^2 - 2mV(z)})dz$ and integrating with respect to z , we obtain

$$\begin{aligned} T^+(B_r, f) &= P^+(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_0^{\infty} dp_0 \int_{-r}^r dy \frac{m}{\sqrt{p_0^2 - 2mV(y)}} f^+(x_0, p_0) \\ &= P^+(\varphi)^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 \int_0^{\infty} dp_0 \left[\int_{-\infty}^{\infty} dy \left(\frac{m}{\sqrt{p_0^2 - 2mV(y)}} - \frac{m}{\sqrt{p_0^2}} \right) + \frac{2rm}{p_0} \right] f^+(x_0, p_0) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

where for the second equality we have used the fact that $(-r, r)$ contains the finite range of the potential. Let $f^\pm(E) \equiv \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 f^\pm(x_0, \sqrt{2mE})$ and

$$\alpha_{\text{d}}^+(E) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dy \left(\sqrt{2m(E - V(y))} - \sqrt{2mE} \right). \quad (\text{A.4})$$

Then, (A.3) may be rewritten into the form

$$T^+(B_r, f) = P^+(\varphi)^{-1} \int_0^{\infty} dE f^+(E) \left(\frac{d\alpha_{\text{d}}^+(E)}{dE} + \frac{2rm}{\sqrt{2mE}} \right). \quad (\text{A.5})$$

In an analogous way one can easily show that

$$T^-(B_r, f) = P^-(\varphi)^{-1} \int_0^{\infty} dE f^-(E) \left(\frac{d\alpha_{\text{d}}^-(E)}{dE} + \frac{2rm}{\sqrt{2mE}} \right) \quad (\text{A.6})$$

where

$$\alpha_{\text{d}}^-(E) \equiv 2 \int_{-\infty}^{\tilde{x}(E)} dy \left(\sqrt{2m(E - V(y))} - \sqrt{2mE} \right) + 2\tilde{x}(E)\sqrt{2mE}, \quad (\text{A.7})$$

$\tilde{x}(E) \equiv \inf_x \{x | E - V(x) = 0\}$ is the reflection point for an incoming particle with energy E and we have assumed $\tilde{x}(E) \leq 0$ for all E . For the free reference times one finds

$$T_{\text{ref}}^{0,\pm}(B_r, f) = P^\pm(\varphi)^{-1} \int_0^{\infty} dE f^\pm(E) \frac{2rm}{\sqrt{2mE}}. \quad (\text{A.8})$$

Finally, using (A.5), (A.6) and (A.8) into (2.21) we obtain (2.23).

Notice that since transmission occurs if $E - \sup_x V(x) > 0$ (and conversely for reflection) one simply has

$$f^\pm(E) = \Theta \left(\pm(E - \sup_x V(x)) \right) f(E) \quad (\text{A.9})$$

where $f(E) \equiv \sqrt{\frac{m}{2E}} \int_{-\infty}^{\infty} dx_0 f(x_0, \sqrt{2mE})$.

Appendix B

In this appendix we indicate how to derive explicit expressions for the transmission and reflection time delays (3.8). For this, it is convenient to work in the two valued energy representation specified by $E = k^2/2m$ and $k/|k|$. The scattering operator on the energy shell $S(E)$ is then given by a 2×2 unitary matrix with elements $(\rho|S(E)|\sigma)$, $\rho, \sigma \in \{+, -\}$ where $(+|S(E)|+)$ $=$ $(-|S(E)|-)$ is the transmission coefficient at energy E and $(-|S(E)|+)$, $(+|S(E)|-)$ are respectively the reflection coefficients for a particle coming from the left and from the right. The sojourn time operator $T_{B_r}(E)$ on the energy shell is also a 2×2 matrix with elements

$$(\rho|T_{B_r}(E)|\sigma) = \frac{m}{\sqrt{2mE}} \int_{-r}^r dx \psi_\rho^*(E, x) \psi_\sigma(E, x), \quad \rho, \sigma \in \{+, -\} \quad (\text{B.1})$$

where $\psi_\pm(E, x) = \sqrt{2\pi}(2E/m)^{1/4} \langle x|\Omega_-|E, \pm\rangle$ are the solutions of the stationary Schrödinger equation $H\psi_\pm(E, x) = E\psi_\pm(E, x)$, with asymptotic forms

$$\psi_+(E, x) = \begin{cases} e^{i\sqrt{2mE}x} + (-|S(E)|+)e^{-i\sqrt{2mE}x}, & x \leq x_1 \\ (+|S(E)|+)e^{i\sqrt{2mE}x}, & x \geq x_2 \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

and

$$\psi_-(E, x) = \begin{cases} (-|S(E)|-)e^{-i\sqrt{2mE}x}, & x \leq x_1 \\ e^{-i\sqrt{2mE}x} + (+|S(E)|-)e^{i\sqrt{2mE}x}, & x \geq x_2. \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Observing that $\psi_\rho^*(E, x)\psi_\sigma(E, x) = \frac{1}{2m} \partial h_{\rho,\sigma}(E, x)/\partial x$ where

$$h_{\rho,\sigma}(E, x) = \left(\frac{\partial \psi_\rho^*}{\partial x} \frac{\partial \psi_\sigma}{\partial E} - \psi_\rho^* \frac{\partial^2 \psi_\sigma}{\partial x \partial E} \right) (E, x) \quad (\text{B.4})$$

one can use (B.2), (B.3) and (B.4) to derive explicit expressions for the matrix elements (B.1), when the interval $(-r, r)$ contains the range of the potential (in our case $(-r, r) \supset (x_1, x_2)$). Let φ be a sufficiently well behaved incoming state describing a particle approaching the potential barrier from the left i.e., $(P\varphi)(E) = \sqrt{2mE}\varphi(E)$ where $\varphi(E)$ is, for example, a Schwartz function with compact support and no support in a neighborhood of the origin. Then, an explicit calculation yields

$$T^\pm(B_r, \varphi) = P^\pm(\varphi)^{-1} \int_0^\infty dE |A^\pm(E)\varphi(E)|^2 \left(\frac{d\alpha^\pm(E)}{dE} + \frac{2rm}{\sqrt{2mE}} + A_{\text{int}}^\pm(E, r) \right) \quad (\text{B.5})$$

where $A^\pm(E) = |A^\pm(E)| \exp(i\alpha^\pm(E)) \equiv (\pm|S(E)|+)$ and the interference terms $A_{\text{int}}^\pm(E, r)$ are given by

$$\begin{aligned} A_{\text{int}}^+(E, r) &= \frac{|A^-(E)|}{2E} \sin(\alpha^-(E) - \alpha^+(E)) \cos(\alpha^+(E) + 2\sqrt{2mE}r) \\ A_{\text{int}}^-(E, r) &= A_{\text{int}}^+(E) + \frac{1}{2E|A^-(E)|} \cos(\alpha^-(E) - \alpha^+(E)) \sin(\alpha^+(E) + 2\sqrt{2mE}r). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Moreover, one obtains for the free reference times

$$T_{\text{int}}^{0,\pm}(B_r, \varphi) = P^\pm(\varphi)^{-1} \int_0^\infty dE |A^\pm(E)\varphi(E)|^2 \left(\frac{2rm}{\sqrt{2mE}} + A_{\text{int}}^{0,\pm}(E, r) \right) \quad (\text{B.7})$$

where $A_{\text{int}}^{0,+}(E, r) = 0$ and $A_{\text{int}}^{0,-}(E, r) = \sin(2\sqrt{2mE}r)/2E|A^-(E)|$. Finally, inserting (B.5) and (B.7) into (3.8) and noting that the oscillating interference terms do not contribute because of the Riemann-Lebesgue lemma, we find (3.10).

References

- [1] Ph. A. Martin: Acta Phys. Austriaca, Suppl. **23**, 159 (1981).
- [2] M. Sassoli de Bianchi, Ph. A. Martin: Helv. Phys. Acta **65**, 1119 (1992).
- [3] Ph. A. Martin: Comm. Math. Phys. **47**, 221 (1976).
- [4] K. Gustafson, K. B. Sinha: Lett. Math. Phys. **4**, 381 (1980).
- [5] D. Bollé, F. Gesztesy, H. Grosse: J. Math. Phys. **24**, 1529 (1983).
- [6] W. O. Amrein, M. B. Cibils: Helv. Phys. Acta **60**, 481 (1987).
- [7] W. O. Amrein, M. B. Cibils, K. B. Sinha: Ann. Inst. Henri Poincaré **47**, 367 (1987).
- [8] A. Jensen: Comm. Math. Phys. **82**, 435 (1981).
- [9] X.-P. Wang: Helv. Phys. Acta **60**, 501 (1987).
- [10] D. Bollé, J. D'Hondt: J. Phys. A **14**, 1663 (1981).
- [11] H. Narnhofer: Phys. Rev. D **22**, 2387 (1980).
- [12] L. E. Eisenbud: Ph. D. Thesis, Princeton Univ. (1948) (unpublished).
- [13] E. P. Wigner: Phys. Rev. **98**, 145 (1955).
- [14] D. Bollé, T. A. Osborn: Phys. Rev. D **13**, 299 (1976).
- [15] J. D. Dollard: Commun. math. Phys. **12**, 193 (1969).
- [16] M. Reed, B. Simon: Methods of Modern Mathematical Physics III, Academic Press, New York (1978).
- [17] H. Narnhofer, W. Thirring: Phys. Rev. A **23**, 1688 (1981).
- [18] D. Bollé, T. A. Osborn: J. Math. Phys **20**, 1121 (1979).
- [19] B. A. van Tiggelen, A. Tip, A. Lagendijk: J. Phys. A, **26**, 1731 (1993).
- [20] W. Jaworski, D. Wardlaw: Phys. Rev. A **37**, 2843 (1988).
- [21] E. H. Hauge, J. A. Støvneng: Rev. Mod. Phys. **61**, 917 (1989).
- [22] M. Büttiker: in "Electronic Properties of Multilayers and Low Dimensional Semiconductor Structures", edited by J. M. Chamberlain et al., Plenum Press, New York, (1990).
- [23] A. I. Baz': Sov. J. Nucl. Phys. **4**, 182 (1967).
- [24] V. F. Rybachenko: Sov. J. Nucl. Phys. **5**, 635 (1967).
- [25] Ph. A. Martin, M. Sassoli de Bianchi: J. Phys. A **25**, 3627 (1992).

- [26] W. Jaworski, D. Wardlaw: *Phys. Rev. A* **40**, 6210 (1989).
- [27] W. Jaworski, D. Wardlaw: *Phys. Rev. A* **43**, 5137 (1991).
- [28] D. Sokolovski, L. M. Baskin: *Phys. Rev. A* **36**, 4604 (1987).
- [29] D. Sokolovski, J. N. L. Connor: *Phys. Rev. A* **42**, 6512 (1990).
- [30] M. Büttiker: *Phys. Rev. B* **27**, 6178 (1982).

IV. Les horloges physiques

1. Introduction

Nous avons montré au chapitre I qu'il était possible de définir une observable temps de séjour en mécanique quantique comme l'intégrale sur le temps t de la probabilité $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r)$ de présence de la particule dans la région b_r . Nous voulons ici adopter un point de vue différent, plus physique, qui consiste à définir le temps de séjour comme le temps qui est mesuré par une horloge.

Une horloge n'est rien d'autre qu'un système physique qui possède une variable dynamique dont le mouvement est connu et suffisamment régulier. L'observation d'une telle variable (la position des aiguilles d'une montre, pour fixer les idées) correspond alors à une mesure (ou réalisation) du temps. Dans le cas qui nous concerne, nous voulons utiliser l'horloge pour mesurer le temps passé par la particule dans la région b_r . Elle devra donc être enclenchée et déclenchée lors de l'entrée et de la sortie de celle-ci de b_r . Cela suppose en particulier un couplage entre les deux systèmes et donc, inévitablement, une perturbation de l'horloge sur le mouvement de la particule.

1.1. L'horloge de Larmor

Une horloge naturelle pour une particule est celle qui exploite le phénomène bien connu de la précession uniforme d'un spin dans un champ magnétique homogène. L'idée est d'appliquer, localement, un champ magnétique constant qui enclenchera et déclenchera la précession du spin à l'entrée et à la sortie de la particule de la région d'intérêt. Dans la limite d'un champ infinitésimal (i.e., dans la limite d'une perturbation minimale de l'horloge sur le mouvement de la particule), et par l'argument de la précession uniforme, l'angle total accumulé par le spin sortant sera proportionnel au temps recherché.

Plus précisément, si le champ magnétique pointe dans la direction de l'axe z , cela revient à considérer l'hamiltonien perturbé

$$H(\lambda) = H + \lambda W S_z \tag{1.1}$$

qui agit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$, avec s qui est le spin de la particule, $\lambda = -\mu B$ (μ est le moment magnétique et B l'intensité du champ), S_z la composante le long de l'axe z du vecteur de spin $\vec{S} = (S_x, S_y, S_z)$, et

$$W = \int d^d x w(x) |x\rangle\langle x| \quad (1.2)$$

l'opérateur de multiplication par la fonction $w(x)$ de localisation du champ magnétique. Pour simplifier la discussion, nous avons supposé que la particule est neutre, par exemple un neutron (dans ce cas $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, $i = x, y, z$, avec σ_i les matrices 2×2 de Pauli, et μ est négatif).

Soient $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$, et Ψ_t l'état du système au temps t . La valeur moyenne

$$\langle S_{\pm} \rangle_t = \langle \Psi_t | S_{\pm} | \Psi_t \rangle \quad (1.3)$$

de l'observable de spin S_{\pm} sur l'état Ψ_t obéit alors à l'équation différentielle [utiliser $[S_z, S_{\pm}] = \pm \hbar S_{\pm}$, et le fait que Ψ_t obéit à l'équation de Schrödinger pour l'hamiltonien (1.1)]

$$\partial_t \langle S_{\pm} \rangle_t = \pm i\lambda \langle S_{\pm} W \rangle_t \quad (1.4)$$

ou encore, sous forme intégrale,

$$\langle S_{\pm} \rangle_t = \langle S_{\pm} \rangle_{t_0} \pm i\lambda \int_{t_0}^t dt' \langle S_{\pm} W \rangle_{t'}. \quad (1.5)$$

Considérons d'abord le cas où l'horloge n'est pas couplée aux degrés de libertés spatiaux de la particule. Cela revient à considérer un champ magnétique qui recouvre tout l'espace, et donc à poser $W = I$ dans (1.5) qui devient

$$\langle S_{\pm} \rangle_t = \langle S_{\pm} \rangle_{t_0} e^{\pm i\lambda(t-t_0)}. \quad (1.6)$$

Plus précisément, (1.6) correspond à un mouvement de rotation uniforme du spin, dans le plan perpendiculaire à la direction du champ, à la vitesse angulaire λ , la fréquence de précession de Larmor. A l'ordre linéaire on trouve

$$\langle S_{\pm} \rangle_t = \langle S_{\pm} \rangle_{t_0} [1 \pm i\lambda(t-t_0)] + O(\lambda^2) \quad (1.7)$$

c'est à dire, l'angle de précession est proportionnel au temps écoulé dans la limite d'un champ magnétique infinitésimal.

Revenons maintenant au cas plus intéressant d'une horloge qui est couplée au mouvement de la particule i.e., $W \neq I$. Ψ_t désigne alors l'état de diffusion (pour le problème avec champ magnétique) avec asymptote future $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} S(\lambda)\phi$ et asymptote passée $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\phi$, avec $\phi = \varphi \otimes \chi$. Nous voulons comparer le spin entrant

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \langle S_{\pm} \rangle_{t_0} = \langle \chi | S_{\pm} | \chi \rangle \equiv \langle S_{\pm} \rangle^{\text{in}} \quad (1.8)$$

avec le spin sortant

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle S_{\pm} \rangle_t = \langle \phi | S^{\dagger}(\lambda) S_{\pm} S(\lambda) \phi \rangle \equiv \langle S_{\pm} \rangle^{\text{out}}. \quad (1.9)$$

L'équation (1.5) nous dit que

$$\langle S_{\pm} \rangle^{\text{out}} = \langle S_{\pm} \rangle^{\text{in}} \pm i\lambda \int dt \langle S_{\pm} W \rangle_t. \quad (1.10)$$

Au premier ordre de perturbation on a $\Psi_t = \psi_t \otimes \chi + O(\lambda)$, avec ψ_t qui est l'état de diffusion pour le problème sans champ magnétique. On trouve donc formellement

$$\langle S_{\pm} \rangle^{\text{out}} = \langle S_{\pm} \rangle^{\text{in}} \left(1 \pm i\lambda \int dt \langle \psi_t | W \psi_t \rangle \right) + O(\lambda^2) \quad (1.11)$$

c'est à dire, l'angle total de précession de la particule diffusée, dans la limite d'un champ infinitésimal, est donné par la valeur moyenne

$$T_{\varphi}(W) = \langle \varphi | T(W) \varphi \rangle \quad (1.12)$$

de l'opérateur

$$T(W) = \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \Omega_{-}^{\dagger} W \Omega_{-} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (1.13)$$

sur l'état entrant φ .

L'argument de la précession uniforme s'applique, bien entendu, seulement si le champ magnétique est constant. Pour mesurer le temps passé par la particule dans la boule b_r , il faudra alors choisir pour fonction de localisation $w(x)$ la fonction caractéristique $\chi_r(x) = 1$, si $|x| \leq r$, et $\chi_r(x) = 0$ autrement. Dans ce cas, W n'est rien d'autre que le projecteur $P_r = \int_{b_r} d^d x |x\rangle \langle x|$, et (1.13) n'est rien d'autre que l'opérateur de temps de séjour dans b_r (voir chapitre I).

Ce résultat, qui sera dérivé de manière rigoureuse dans l'article ci-après (section 2), nous dit que la définition abstraite du temps de séjour est équivalente au temps mesuré par l'horloge physique de Larmor. L'approche par l'horloge de Larmor présente aussi d'autres avantages. Nous montrerons par exemple que l'origine des termes d'interférence dans le temps de séjour (voir section I.4) est liée au phénomène de réflexion des ondes incidentes et diffusées aux frontières du champ magnétique. Ces termes contribuent même au premier ordre en λ et sont donc à comprendre comme l'effet de perturbation minimale de l'horloge sur le mouvement de la particule. Mais nous verrons aussi qu'ils disparaissent si le champ est enclenché et déclenché graduellement, sur des distances qui sont grandes comparées à la longueur d'onde de de Broglie de la particule incidente.

Les méthodes que nous allons développer pour étudier l'horloge de Larmor peuvent facilement s'adapter à d'autres types d'horloges, dont voici deux exemples.

1.2. L'horloge dissipative

Une autre modélisation possible pour une horloge consiste à exploiter le taux constant d'absorption d'un milieu dissipatif homogène. Cela revient à considérer un hamiltonien

$$H(\lambda) = H - i\lambda W \quad (1.14)$$

avec un terme purement dissipatif $-i\lambda W$. L'évolution est alors donnée par l'opérateur de contraction [Ma3]

$$U(t, t_0) = \begin{cases} e^{-\frac{i}{\hbar}H(\lambda)(t-t_0)}, & t > t_0 \\ e^{-\frac{i}{\hbar}H^*(\lambda)(t-t_0)}, & t < t_0, \end{cases} \quad (1.15)$$

et le produit scalaire $\mathcal{P}_t = \langle \Psi_t | \Psi_t \rangle$ peut s'interpréter comme la probabilité pour que la particule soit toujours présente (i.e., ne soit pas absorbée) au temps t . Pour $t > t_0$, elle obéit à l'équation

$$\mathcal{P}_t = \mathcal{P}_{t_0} - 2 \frac{\lambda}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle \Psi_{t'} | W \Psi_{t'} \rangle \quad (1.16)$$

qui, dans le cas homogène $W = I$, s'intègre pour donner la loi de décroissance exponentielle

$$\mathcal{P}_t = \mathcal{P}_{t_0} e^{-2\frac{\lambda}{\hbar}(t-t_0)}. \quad (1.17)$$

Au premier ordre on trouve

$$\mathcal{P}_t = \mathcal{P}_{t_0} \left[1 - 2 \frac{\lambda}{\hbar} (t - t_0) \right] + O(\lambda^2), \quad (1.18)$$

c'est à dire un taux d'absorption linéaire dans le temps. Si $W \neq I$ et si Ψ_t est l'état de diffusion au temps t en présence du milieu absorbant, alors $\Psi_t = \psi_t + O(\lambda)$, et la probabilité de trouver la particule à $t \rightarrow \infty$ vaut d'après (1.16)

$$\mathcal{P}^{\text{out}} = \mathcal{P}^{\text{in}} \left(1 - 2 \frac{\lambda}{\hbar} \int dt \langle \psi_t | W \psi_t \rangle \right) + O(\lambda^2), \quad (1.19)$$

avec $\mathcal{P}^{\text{out}} = \| S(\lambda)\varphi \|^2$ et $\mathcal{P}^{\text{in}} = \|\varphi\|^2$. Si $\|\varphi\|^2 = 1$ et $W = P_r$, on obtient la même réponse que pour l'horloge de Larmor (voir aussi [D]).

1.3. L'horloge de Büttiker-Landauer modifiée

Dans un article qui est resté controversé, Büttiker et Landauer [BL] (voir aussi [HS]) proposent de caractériser le temps passé par la particule diffusée dans la région du potentiel comme l'inverse d'une fréquence caractéristique. Plus précisément, leur idée est d'appliquer dans la région d'intérêt une perturbation périodique dans le temps $\lambda(\omega t)W$, de période $2\pi/\omega$, et de chercher ensuite une fréquence ω_c qui sépare le régime adiabatique du régime haute fréquence. L'inverse de ω_c serait alors proportionnel au temps passé par la particule dans le support de W , du moins dans la limite d'un faible couplage. Sans

entrer dans les détails, disons seulement qu'un tel schéma ne permet pas de déduire un temps de séjour global, mais seulement des "temps" associés à la transmission et à la réflexion séparément. Ces temps sont donnés par la partie imaginaire du temps complexe [III, (1.12)] mais leur interprétation est différente de celle proposée originalement par Büttiker et Landauer [S].

Comme nous l'avons rappelé au début de cette section, une horloge n'est rien d'autre qu'un système physique qui possède une variable dynamique dont l'évolution est connue et suffisamment régulière. Où est cette variable dans l'horloge de Büttiker-Landauer? C'est, bien entendu, l'énergie du système. En effet, l'hamiltonien perturbé

$$H(\lambda) = H + \lambda(\omega t)W \quad (1.20)$$

dépend explicitement du temps et l'énergie moyenne $\langle E \rangle_t = \langle \Psi_t | H(t) \Psi_t \rangle$ n'est plus conservée au cours du temps. Elle obéit à l'équation [$\lambda'(\alpha) = \partial_\alpha \lambda(\alpha)$]

$$\langle E \rangle_t = \langle E \rangle_{t_0} + \omega \int_{t_0}^t dt' \lambda'(\omega t') \langle \Psi_{t'} | W \Psi_{t'} \rangle. \quad (1.21)$$

Si $W = I$, on obtient

$$\begin{aligned} \langle E \rangle_t &= \langle E \rangle_{t_0} + \lambda(\omega t) - \lambda(\omega t_0) \\ &= \langle E \rangle_{t_0} + \omega \lambda'(0)(t - t_0) + O(\omega^2) \end{aligned} \quad (1.22)$$

c'est à dire, l'énergie du système varie, au premier ordre en ω et λ , linéairement dans le temps. Pour $W \neq I$, nous voulons comparer l'énergie entrante

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} \langle E \rangle_{t_0} = \langle \varphi | H_0 \varphi \rangle \equiv \langle E \rangle^{\text{in}} \quad (1.23)$$

avec l'énergie sortante

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \langle E \rangle_t = \langle \varphi | S^\dagger(\lambda) H_0 S(\lambda) \varphi \rangle \equiv \langle E \rangle^{\text{out}}. \quad (1.24)$$

Au premier ordre en ω et λ , on trouve [utiliser $\Psi_t = \psi_t + O(\lambda)$ et (1.21)]

$$\langle E \rangle^{\text{out}} = \langle E \rangle^{\text{in}} + \omega \lambda'(0) \int dt \langle \psi_t | W \psi_t \rangle + O(\omega^2) + O(\lambda^2), \quad (1.25)$$

et si $W = P_r$, on obtient à nouveau la même réponse que pour les horloges de Larmor et dissipative.

On peut rendre ce dernier résultat mathématiquement plus précis à l'aide des résultats sur la limite adiabatique que nous présentons dans la troisième partie de cette thèse. Nous terminons ici par une remarque. Les trois horloges décrites ci-dessus peuvent aussi être utilisées pour définir des temps de séjour conditionnels. Par exemple, dans le cas de l'horloge de Larmor, en considérant l'angle de précession associé aux parties transmises et réfléchies séparément. Pour les trois horloges on trouvera, à chaque fois, essentiellement la même réponse: la partie réelle du temps complexe [III, (1.12)].

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *On the theory of the Larmor clock and time-delay*, J. Phys. A, **25**, 1992, pp. 3627-3647.

On the theory of the Larmor clock and time delay

Ph. A. Martin and M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. Using the time dependent scattering theory we prove that, in any spatial dimension and for arbitrary spin, the reading of the Larmor clock agrees with the global (Eisenbud-Wigner) time delay in the limit of an infinitesimal magnetic field. We show that convergence is also achieved at fixed energy (without oscillating terms) in the limit where the spatial switching on of the field occurs on distances much larger than the de Broglie wave length of the particle. Finally, we investigate the functioning of the spin clock beyond the linear response regime.

1. Introduction

In recent years, the concept of tunneling time of a quantum mechanical particle has been the subject of many studies, mainly motivated by the prospect of high speed devices based on tunneling structures in semi-conductors (see the review paper [1] and references therein). One of the proposals (the Larmor clock originally introduced in [2,3]) is to measure the duration of a scattering event by means of the precession of a spin in a weak homogeneous magnetic field. Heuristically, a constant magnetic field applied on the region where the scattering takes place will set the spin into uniform rotation, and so the total precession angle will be proportional to the time elapsed during the collision process.

This picture has been substantiated in [4] by a detailed study of the motion of a one dimensional wave packet through a potential barrier in presence of a magnetic field. A freely moving wave packet first enters a region where a uniform magnetic field is applied, far away from the scattering center. Then, it undergoes the scattering process in presence of the field, and finally the scattered waves leave the field region. Retaining in the phase of the wave function only the contributions that are linear in the field, the authors show that the reading of the clock agrees with the Eisenbud-Wigner time delay (see [5] and references therein, and [6], ch. 7-2), i.e., the derivative of the phase shift with respect to energy (also called classic or asymptotic phase time).

In ref.[7], the authors point out the intimate relation between the linear response of the scattering operator to an additional external perturbation and the sojourn (or dwell) time for a particle in some spatial region. With this relation, they can easily establish that the (infinitesimal) rotation of the spin of a neutral particle is proportional to the sojourn time, so the difference of the precession angles relative to the interacting and free motion is proportional to the difference of the corresponding sojourn times. Since

the latter quantity converges to the Eisenbud-Wigner time delay for large spatial regions [5,6], one finds in this way that the reading of the clock coincides with the classical phase time for infinitesimal fields. All the considerations in [7] are restricted to one dimension and rely on formulae of the stationary scattering states formalism.

The purpose of this work is twofold. To begin with, we generalize in sections 2 and 3 the result of [7] to all space dimensions $d = 1, 2, 3$ and arbitrary spin s (for a neutral or charged particle). We feel that the connection between the linear response of the S -operator and the sojourn time can be exhibited more simply and with greater generality by using the methods of time dependent scattering theory¹. We find that in any dimensions d the reading of the Larmor clock constituted by a (neutral or charged) particle with spin s in an infinitesimal field is always given by the Eisenbud-Wigner time delay, provided that one works with wave packets and extends the field region to the whole \mathbb{R}^d .

Then, in section 4, we consider again the problem from the view point of time-independent scattering theory with spherically symmetric potentials. When the magnetic field is switched on abruptly in space (i.e., a step function), it has been noted a long time ago that the convergence to the Eisenbud-Wigner time delay is not achieved at fixed energy because of the existence of oscillating terms. These oscillating terms, whose physical origin is the interference of reflected waves at the boundaries of the magnetic field, have been the subject of several discussions in the literature (see for example [4,9,10]). In a good spin clock, the magnetic field should be responsible for the precession of the spin, but should not cause additional perturbative effects on the orbital degrees of freedom, which would interfere with those due to the scattering process under investigation. Our point here is that this can be achieved if the magnetic field is produced by a macroscopic device with the following properties: it extends on a region of much larger size than that of the (microscopic) range of the scattering potential and its spatial switching on occurs on a much larger scale than the de Broglie wave length of the scattered particle. With such a model of the magnetic field (precisely defined in section 4) we prove the convergence to the Eisenbud-Wigner time delay at fixed energy when the field covers the whole space and its gradient becomes vanishingly small in the transition region.

So far, all the above results have been obtained in the framework of the linear response theory. In section 5, we address the problem of understanding the functioning of the spin-clock, for a neutral particle, beyond the linear response regime for the case of a spherically symmetric potential. With the same model as in section 4, we show that, in the scattering operator, the magnetic field results asymptotically in a phase factor depending only on the energy and the spin component, but not on the angular momentum. Consequently, the magnetic field is transparent in the sense that it causes no deflection of the particle. Then, we find that in a weak but not necessarily infinitesimal field, when there is no dispersion

¹ After submission of this work, the authors of [7] kindly informed us on their forthcoming paper [8] where the same generalization is considered.

in energy, the measure of the rotation angle of a spin-1/2 particle after the scattering process (relative to the free motion) still gives a relevant information, expressed now in terms of finite energy differences of phase shifts. Of course only the linear term, which agrees with the energy derivative of the phase shifts found previously, has the legitimate interpretation of the time delay of the scattering process. Finally, when the incoming state has some non negligible dispersion in energy, one observes an attenuation of the outgoing spin vector, due to a spatial splitting, inside the magnetic field region, of the up and down parts of the incoming wave packet (relative to field direction).

2. Response of a scattering system to a perturbation

We consider a quantum particle in d dimensions ($d = 1, 2, 3$), with kinetic energy $H_0 = -\hbar^2 \Delta / 2m$ (Δ is the Laplacian in \mathbb{R}^d), which is scattered by a potential $v(\vec{x}) + \lambda w(\vec{x})$, where $\lambda w(\vec{x})$ is a perturbation of $v(\vec{x})$; $w(\vec{x})$ is supposed to be bounded and with compact support, λ is a coupling constant in the range $|\lambda| \leq \lambda_0 < \infty$. We denote by $U_t = \exp(-iH_0 t / \hbar)$ and $V_t = \exp(-iH(\lambda)t / \hbar)$ the evolution groups generated by H_0 and $H(\lambda) = H_0 + v + \lambda w$. We assume that for each λ in the range $|\lambda| \leq \lambda_0$, $(H_0, H(\lambda))$ forms a complete scattering system [6] with wave operators

$$\Omega_{\pm}(\lambda) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} \Omega_{\pm,t}(\lambda), \quad \Omega_{\pm,t}(\lambda) = V_{\pm t}^{\dagger}(\lambda) U_{\pm t} \quad (2.1)$$

such that $\text{Range } \Omega_+(\lambda) = \text{Range } \Omega_-(\lambda)$. The scattering operator is defined by

$$S(\lambda) = \Omega_+^{\dagger}(\lambda) \Omega_-(\lambda) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} S_t(\lambda) \quad (2.2)$$

with

$$S_t(\lambda) = \Omega_{+,t}^{\dagger}(\lambda) \Omega_{-,t}(\lambda) = U_t^{\dagger} V_{2t}(\lambda) U_{-t}. \quad (2.3)$$

We like to compute the linear response of the scattering operator to the perturbation λw . For this, we note that $S_t(\lambda)$ can easily be expanded around $\lambda = 0$, using the usual time-dependent perturbation (Dyson's) series at first order in λ (the series converge for a bounded w)

$$S_t(\lambda) = \Omega_{+,t}^{\dagger} \left(1 - \frac{i\lambda}{\hbar} \int_{-t}^t ds V_s^{\dagger} w V_s \right) \Omega_{-,t} + O(\lambda^2) \quad (2.4)$$

giving

$$\left. \frac{\partial}{\partial \lambda} S_t(\lambda) \right|_{\lambda=0} = -\frac{i}{\hbar} \Omega_{+,t}^{\dagger} \left(\int_{-t}^t ds V_s^{\dagger} w V_s \right) \Omega_{-,t}. \quad (2.5)$$

In (2.4) and (2.5), the operators $V_t \equiv V_t(0)$, $\Omega_t \equiv \Omega_t(0)$ and $S_t \equiv S_t(0)$ refer to the unperturbed scattering system ($H_0, H = H_0 + v$). Permuting the infinite time limit and

the derivative with respect to λ we obtain formally from (2.1), (2.2) and (2.5) the linear response formula

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \lambda} S(\lambda) \Big|_{\lambda=0} &= \text{w-lim}_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \lambda} S_t(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \Omega_+^\dagger \left(\int_{-\infty}^{\infty} ds V_s^\dagger w V_s \right) \Omega_-.\end{aligned}\quad (2.6)$$

Using $S^\dagger \Omega_+ = \Omega_-^\dagger$ one can also write (2.6) in the form

$$i\hbar S^\dagger \frac{\partial}{\partial \lambda} S(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \equiv T(w), \quad (2.7)$$

with

$$\begin{aligned}T(w) &= \Omega_-^\dagger \left(\int_{-\infty}^{\infty} ds V_s^\dagger w V_s \right) \Omega_- \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} ds U_s^\dagger \Omega_-^\dagger w \Omega_- U_s\end{aligned}\quad (2.8)$$

where the last equality follows from the intertwining relations $V_t \Omega_\pm = \Omega_\pm U_t$. In appendix A we give conditions for the validity of the formulae (2.6)-(2.8). They hold for sufficiently regular short-ranged potentials on a dense set of states \mathcal{D} and the limit (2.6) has to be understood in the weak sense. If $w(\vec{x}) = \chi_R(\vec{x})$ is the characteristic function of the sphere of radius R , we see that

$$(\varphi, T(\chi_R)\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} ds \|\chi_R V_s \psi\|^2, \quad \psi = \Omega_- \varphi, \varphi \in \mathcal{D}, \quad (2.9)$$

is the sojourn time in the sphere of the particle scattered by the potential v and with incoming state φ .

3. The Larmor clock

A neutral particle of spin s is scattered by the potential $v(\vec{x})$ and submitted to a static magnetic field $\vec{B}(\vec{x}) = (0, 0, B_z(\vec{x}))$ applied in the z -direction on the region where the scattering takes place. We write the magnetic energy $-\mu B_z(\vec{x}) \Sigma_z$ (Σ_z is the z -component of the spin operator and μ the magnetic moment) in the form $\lambda w(\vec{x}) \Sigma_z$ where $w(\vec{x})$ is a dimensionless local bounded function whose support determines the spatial region where the field is applied and λ is a measure of the field strength (λ has the dimension of a frequency). Specific forms of the cut off function $w(\vec{x})$ will be discussed in the next section. The total Hamiltonian, still noted $H(\lambda)$, is $H(\lambda) = H_0 + v + \lambda w \Sigma_z$. The scattering system $(H_0, H(\lambda))$ has wave and scattering operators acting on $L^2(\mathbb{R}^d) \otimes \mathbb{C}^{2s+1}$ still noted $\Omega_\pm(\lambda)$ and $S(\lambda)$.

Let $\phi = \varphi \otimes \chi$ be a normalized incoming state with orbital wave function $\varphi \in \mathcal{D}$, spin state χ and Σ a spin operator (Σ may be for example a combination $\Sigma_\pm = \Sigma_x \pm i\Sigma_y$). The average value of Σ after the scattering process, noted $\langle \Sigma \rangle^{\text{out}}(\lambda)$, is given by

$$\langle \Sigma \rangle^{\text{out}}(\lambda) = (S(\lambda)\phi, \Sigma S(\lambda)\phi) \quad (3.1)$$

The response of $\langle \Sigma \rangle^{\text{out}}(\lambda)$ to an infinitesimal field can be computed from (2.7),(2.8) with w replaced by $w\Sigma_z$. Using the fact that $S \equiv S(0)$ commute with the spin operators and $T^\dagger(w\Sigma_z) = T(w\Sigma_z)$, we find

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \Sigma \rangle^{\text{out}}(\lambda) \Big|_{\lambda=0} &= \left(\frac{\partial S}{\partial \lambda}(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \phi, \Sigma S \phi \right) + \left(S \phi, \Sigma \frac{\partial S}{\partial \lambda}(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \phi \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\phi, [T(w\Sigma_z), \Sigma] \phi \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\chi, [\Sigma_z, \Sigma] \chi \right) (\varphi, T(w)\varphi) \end{aligned} \quad (3.2)$$

where $[\Sigma_z, \Sigma]$ denotes the commutator between Σ_z and Σ . If for instance we set $\Sigma = \Sigma_\pm$ and $w = \chi_R$ in (3.2), we deduce that up to the first order in λ

$$\langle \Sigma_\pm \rangle^{\text{out}}(\lambda) = \left(1 \pm i\lambda (\varphi, T(\chi_R)\varphi) \right) \langle \Sigma_\pm \rangle^{\text{in}} + O(\lambda^2) \quad (3.3)$$

which means that during the scattering process, the spin vector $\langle \vec{\Sigma} \rangle^{\text{in}} = (\langle \Sigma_x \rangle^{\text{in}}, \langle \Sigma_y \rangle^{\text{in}})$ has accomplished an infinitesimal rotation of angle

$$\alpha_\varphi(\chi_R, \lambda) = \lambda (\varphi, T(\chi_R)\varphi) + O(\lambda^3) \quad (3.4)$$

given by the product of the Larmor frequency of the field with the sojourn time of the particle in the region $|x| \leq R$ where the field is applied. If we subtract from $\alpha_\varphi(\chi_R, \lambda)$ the angle which would occur if the potential v is set equal to zero and then take the limit of an infinitely extended space region, we obtain

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\alpha_\varphi(\chi_R, \lambda) - \alpha_{0\varphi}(\chi_R, \lambda) \right) \Big|_{\lambda=0} = \lim_{R \rightarrow \infty} \left((\varphi, T(\chi_R)\varphi) - (\varphi, T_0(\chi_R)\varphi) \right) = (\varphi, \tau\varphi). \quad (3.5)$$

In (3.5), the quantities with an index 0 refer to the system $(H_0, H_0 + \chi_R \Sigma_z)$ without scattering potential v and τ is the Eisenbud-Wigner time delay operator with energy shell components [6, ch.7-2]

$$\tau_E = -i\hbar S_E^\dagger \frac{\partial S_E}{\partial E} \quad (3.6)$$

where S_E is the scattering operator of the system (H_0, H) at fixed energy E (i.e., a unitary operator acting on $L^2(\sigma^{d-1})$, the square integrable functions of the surface σ^{d-1} of the unit sphere in \mathbb{R}^d). More generally, for any spin observable Σ , one obtains from (3.2),(3.5)

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\langle \Sigma \rangle^{\text{out}}(\lambda) - \langle \Sigma \rangle_0^{\text{out}}(\lambda) \right) \Big|_{\lambda=0} = \frac{i}{\hbar} \left(\chi, [\Sigma_z, \Sigma] \chi \right) (\varphi, \tau\varphi). \quad (3.7)$$

The existence of the infinite space limit (3.5),(3.7) for suitable wave packets φ has been established in a number of works (e.g., [11,12] for spherically symmetric potentials

and [13] for potentials which are not necessarily rotation invariant; in the context of one dimensional tunneling, see [4,14] and also [7] where the corresponding linear response relation (2.6) can be found). Notice that the existence of the limit (3.5) does not require the choice $w(x) = \chi_R(x)$ (corresponding to an abrupt spatial switching on of the magnetic field), but holds also for sequences $w(x) = w_R(x)$ of smooth spherically symmetric cut off functions, corresponding to a smooth switching on of the field, such that $\lim_{R \rightarrow \infty} w_R(x) = 1$ (e.g., [13,15,16]). In any case, there is a large class of potentials v and cut off functions w_R for which the limit (3.5) holds. We therefore see that the linear response to a magnetic field of a scattered neutral particle in d -dimensions with arbitrary spin s gives the Eisenbud-Wigner time delay in the sense of formulae (3.5),(3.7). These formulae involve three limiting procedures: the infinite time limit (2.2), the linearisation with respect to the field strength and the extension of the field action to the whole space \mathbb{R}^d . The infinite time limit is required as usual to have a complete scattering event. The need for the existence of the last limit is justified by the request that the spin clock should provide an intrinsic information on the scattering process, independent of the size of the region and the manner in which the field is applied. This limit cannot be permuted with the two first ones. If the field is taken constant on \mathbb{R}^d at first (i.e., $w(\vec{x}) = 1$ in $H(\lambda)$), it is clear that the spin decouples from the orbital degrees of freedom and is not affected by the scattering process.

We have considered, for simplicity, the case of a neutral particle. If the particle has a charge q , the formulae (3.2)-(3.5) remain the same. Indeed, the total hamiltonian for a charged particle has the form

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda w \Sigma_z + \frac{q}{2m} (\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}) + \frac{q^2}{2m} |\vec{A}|^2 \quad (3.8)$$

where \vec{P} is the momentum and $\vec{A}(\vec{x})$ is the potential vector ($\vec{B} = \vec{\nabla} \wedge \vec{A}$). Thus, one has to replace λw in the linear response formula (2.6) by the part of the interaction which is linear in the field strength, i.e., by $\lambda w \Sigma_z + (q/2m)(\vec{P} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P})$, but the contribution to (3.2) of this additional term vanishes since it commutes with the spin operators.

It is worth to emphasize that in (3.1) and the subsequent discussion, we have considered the average outgoing spin without the specification of any scattering direction. In particular, since Σ_z is a constant of the motion, it commutes with $S(\lambda)$ and thus $\langle \Sigma_z \rangle^{\text{out}}(\lambda) = \langle \Sigma_z \rangle^{\text{in}}$.

Let P_Ω be the projection on some solid angle Ω in momentum space. Then, one can also consider the average spin when the outgoing particle is found in Ω (in one dimension, the spin associated with the transmitted or reflected waves separately) i.e.,

$$\langle \Sigma P_\Omega \rangle^{\text{out}}(\lambda) = (S(\lambda)\phi, \Sigma P_\Omega S(\lambda)\phi). \quad (3.9)$$

Since P_Ω does not commute with the scattering operator, one finds now a change of the z -component of the spin when the particle is detected in Ω . Working out the linear response

term in this case, we obtain

$$\begin{aligned} \langle \Sigma_z P_\Omega \rangle^{\text{out}}(\lambda) &= \langle \Sigma_z \rangle^{\text{in}}(\varphi, S^\dagger P_\Omega S \varphi) \\ &+ \frac{2\lambda}{\hbar} \langle \Sigma_z^2 \rangle^{\text{in}} \text{Im}(\varphi, S^\dagger P_\Omega S T(w) \varphi) + O(\lambda^2). \end{aligned} \quad (3.10)$$

In the context of one dimensional scattering, this observation led Büttiker [17] to associate transmission and reflection times with this change of the z -component of the spin. The definition and possible interpretation of these times are also discussed in ref. [18]. In the present paper, we shall only be interested in the total outgoing spin (3.1) and its relation to the global (Eisenbud-Wigner) time delay.

4. The Larmor clock on the energy shell: the smooth switching on of the magnetic field

In the preceding section, we have just seen that in order to observe a non trivial effect of the scattering on the spin motion it is necessary for the particle to enter and leave the field region, however weak is the field and large is the region. In principle, the dynamics of the particle should depend on the nature of the transition region for the field. It is a non trivial result in the theory of the Eisenbud-Wigner time delay that, when dealing with wave packets and extending ultimately the field to the whole space, the limit (3.5) is in fact independent of the details of this transition region (see references quoted after (3.7)).

The situation is however very different when one works in the formalism of stationary scattering theory at fixed energy E (without averaging on the energy of the packet). Let $w(r)$ be a spherically symmetric spatial cut off function, and denote by $S_E(\lambda)$ the scattering operator at fixed energy E for the system $(H_0, H(\lambda))$ described in section 2 ($S_E(\lambda)$ acts on $L^2(\sigma^{d-1})$). In the rest of this section, we shall mainly be concerned by the three dimensional scattering problem with a rotation invariant potential $v(r)$. Then, $S_E(\lambda)$ is diagonal in the basis $|l, m\rangle$ of eigenvectors of the orbital momentum, with matrix elements

$$\langle \ell, m | S_E(\lambda) | \ell, m \rangle = S_E^\ell(\lambda) = e^{2i\delta_E^\ell(\lambda)} \quad (4.1)$$

expressed in terms of the phase shifts $\delta_E^\ell(\lambda)$ in the usual way.

The response equivalent to (2.6) in the stationary formalism follows from the observation that the perturbed and unperturbed phase shifts $\delta_E^\ell(\lambda)$ and $\delta_E^\ell \equiv \delta_E^\ell(0)$ are related by [19, ch.X, §17]

$$\sin(\delta_E^\ell(\lambda) - \delta_E^\ell) = -\frac{2m\lambda}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr u_E^\ell(r, \lambda) w(r) u_E^\ell(r), \quad \hbar k = \sqrt{2mE}, \quad (4.2)$$

where $u_E^\ell(r, \lambda)$ is the regular solution of the radial Schrödinger equation

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + E - v(r) - \lambda w(r) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) u_E^\ell(r, \lambda) = 0 \quad (4.3)$$

with asymptotic form

$$u_E^\ell(r, \lambda) = \sin(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_E^\ell(\lambda)) + O(r^{-1}) \quad (4.4)$$

as $r \rightarrow \infty$, and $u_E^\ell(r)$ is the corresponding solution of (4.3) with $\lambda = 0$. Differentiating (4.2) with respect to λ at $\lambda = 0$ gives immediately

$$\begin{aligned} i\hbar S_E^{\ell*} \frac{\partial}{\partial \lambda} S_E^\ell(\lambda) \Big|_{\lambda=0} &= -2\hbar \frac{\partial}{\partial \lambda} \delta_E^\ell(\lambda) \Big|_{\lambda=0} \\ &= \frac{4m}{\hbar k} \int_0^\infty dr w(r) (u_E^\ell(r))^2 \\ &\equiv T_E^\ell(w) \end{aligned} \quad (4.5)$$

which are the energy shell and orbital momentum components of the operator (2.7). In particular, if $w(r) = \chi_R(r)$ (the characteristic function of the sphere of radius R), one recovers the well-known expression of the sojourn time at fixed energy [5,10]

$$T_E^\ell(\chi_R) = \frac{4m}{\hbar k} \int_0^R dr (u_E^\ell(r))^2. \quad (4.6)$$

If one consider now the hamiltonian of section 3 (with spin included), the corresponding energy shell scattering operator $S_E(\lambda)$ is diagonal in the basis of eigenvectors of Σ_z and is simply obtained replacing w in (4.2),(4.3) by $\Sigma_z w$. In particular, the stationary representation of (3.2) is

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle \Sigma \rangle_{E,\ell}^{\text{out}}(\lambda) \Big|_{\lambda=0} = \frac{i}{\hbar} (\chi, [\Sigma_z, \Sigma] \chi) T_E^\ell(\chi_R). \quad (4.7)$$

The asymptotic behavior of $T_E^\ell(\chi_R)$ for large R has been studied in several papers (e.g., [10] in the context of sojourn times and [2,3] in connexion to the spin clock) and is given by

$$T_E^\ell(\chi_R) = \frac{2mR}{\hbar k} + 2\hbar \frac{\partial \delta_E^\ell}{\partial E} - \frac{\hbar}{2E} \sin(2kR - \ell\pi + 2\delta_E^\ell) + o(1). \quad (4.8)$$

An important point here is the occurrence of oscillating terms with R as $R \rightarrow \infty$. Because of them, the difference

$$\begin{aligned} T_E^\ell(\chi_R) - T_{0E}^\ell(\chi_R) &= 2\hbar \frac{\partial \delta_E^\ell}{\partial E} \\ &- \frac{\hbar}{2E} [\sin(2kR - \ell\pi + 2\delta_E^\ell) - \sin(2kR - \ell\pi)] + o(1) \end{aligned} \quad (4.9)$$

of the full sojourn time $T_E^\ell(\chi_R)$ and the free sojourn time $T_{0E}^\ell(\chi_R)$ (obtained by setting $\delta_E^\ell = 0$ in (4.8)) does not converge at fixed energy as $R \rightarrow \infty$ (the oscillating terms do not compensate). Of course this is not in contradiction with the existence of the limit

(3.5) for wave packets: when (4.8) is averaged over a smooth energy distribution, the oscillating contribution vanishes by the Riemann-Lebesgue lemma. As a consequence, the limit (3.5) is not uniform with respect to the choice of the incoming packet: the better is the energy definition of the incoming beam, the wider must be the field region. In fact, the oscillating terms in (4.8) have a clear physical origin which is discussed in [9] (three dimensional scattering) and [4] (one dimensional problem). They result from interferences due to reflected waves at the sharp frontiers of the magnetic field (described as a step potential). These interference terms remain at the linear order in the field. It has been argued that these terms are "spurious" in the sense that they do not pertain only to the scattering process by the potential v under investigation, but originate in the boundaries of the magnetic field; thus they have to be disregarded in a way or another.

As we have already emphasized, the particle has to enter and leave the field region and the physical effects of the transition region (if there are some) have to be taken into account in the theory of the Larmor clock: in principle, they cannot be observationally disentangled from those due to the scattering potential v alone. To our knowledge, the existing literature has only discussed the abrupt switching on of the field (step function) and the resulting oscillating terms in (4.8). This switching on, which idealize a situation where the field strength changes on a much smaller scale than the de Broglie wave length of the particle, is admittedly not very realistic if the field is supposed to be produced by a macroscopic device. In this case, it is more legitimate to assume that in the transition region the field variation occurs on distances much larger than the de Broglie wave length of the particle. We model this situation with a cut off function $w_R(r)$ such that

$$w_R(r) = \begin{cases} 1 & r \leq R \\ g\left(\frac{r-R}{\rho}\right) & r > R \end{cases} \quad (4.10)$$

where $g(r)$ is a twice continuously differentiable function with compact support, $0 \leq g(r) \leq 1$ and $g(0) = 1$. Clearly $dw_R(r)/dr = O(\rho^{-1})$ for $r > R$, so ρ^{-1} is a measure of the size of the field gradient in the transition region. We have the following result

Proposition 1. *Assume that the potential $v(r)$ fulfills the condition*

$$\int_r^\infty ds s|v(s)| = N(r) < \infty, \quad 0 \leq r < \infty. \quad (4.11)$$

Then, for any fixed ℓ and $E > 0$, we have

$$\begin{aligned} -2\hbar \frac{\partial}{\partial \lambda} \delta_E^\ell(\lambda) \Big|_{\lambda=0} &= T_E^\ell(w_R) \\ &= \frac{2m}{\hbar k} \int_0^\infty dr w_R(r) + 2\hbar \frac{d\delta_E'}{dE} \\ &\quad + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}) + O(N(R)). \end{aligned} \quad (4.12)$$

Proof. Since $u_E^\ell(r)$ verifies (4.3) (with $\lambda = 0$), one has the identity

$$(u_E^\ell(r))^2 = \frac{d}{dr} h_E^\ell(r) \quad (4.13)$$

with

$$h_E^\ell(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial u_E^\ell}{\partial r} \frac{\partial u_E^\ell}{\partial E} - u_E^\ell \frac{\partial^2 u_E^\ell}{\partial r \partial E} \right) (r). \quad (4.14)$$

It is shown in appendix B that under the condition (4.11), $h_E^\ell(r)$ has the asymptotic behavior as $r \rightarrow \infty$

$$h_E^\ell(r) = \frac{r}{2} + \frac{\hbar^2 k}{2m} \frac{d\delta_E^\ell}{dE} - \frac{1}{4k} \sin(2kr - \ell\pi + 2\delta_E^\ell) + O(r^{-1}) + O(N(r)). \quad (4.15)$$

Since $h_E^\ell(0) = 0$ ($u_E^\ell(r)$ is the regular solution of (4.3)) and $w_R(r)$ is constant for $r \leq R$, an integration by parts of (4.5) gives

$$\begin{aligned} T_E^\ell(w_R) &= -\frac{4m}{\hbar k} \int_R^\infty dr g' \left(\frac{r-R}{\rho} \right) h_E^\ell(r) \\ &= -\frac{4m}{\hbar k} \int_0^\infty dr g'(r) h_E^\ell(\rho r + R) \end{aligned} \quad (4.16)$$

where $g'(r) = dg(r)/dr$. For R large enough, we can insert in (4.16) the asymptotic behavior (4.15). After an integration by parts of the linear term in r and using $g(0) = 1$, we obtain

$$\begin{aligned} T_E^\ell(w_R) &= \frac{2mR}{\hbar k} + \frac{2m\rho}{\hbar k} \int_0^\infty dr g(r) + 2\hbar \frac{d\delta_E^\ell}{dE} \\ &\quad + \frac{\hbar}{2E} \int_0^\infty dr g'(r) \sin(2k\rho r + 2kR - \ell\pi + 2\delta_E^\ell) \\ &\quad + \frac{\hbar}{2E} \int_0^\infty dr g'(r) \left(O\left(\frac{1}{\rho r + R}\right) + O(N(\rho r + R)) \right). \end{aligned} \quad (4.17)$$

Since $(\rho r + R)^{-1} < R^{-1}$, the last term is $O(1/R) + O(N(R))$ for all ρ . Moreover, after an integration by parts, we find that the fourth term in (4.17) is less than

$$\left(\frac{1}{k\rho} \right) \frac{\hbar}{4E} \left(|g''(0)| + \int_0^\infty dr |g''(r)| \right) = O(\rho^{-1}) \quad (4.18)$$

uniformly with respect to R . Finally, the sum of the two first terms of (4.17) equals $(2m/\hbar k) \int_0^\infty dr w_R(r)$ and this proves (4.12).

We now see that

$$\lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \rho \rightarrow \infty}} \left(T_E^\ell(w_R) - T_0^\ell(w_R) \right) = 2\hbar \frac{d\delta_E^\ell}{dE} \quad (4.19)$$

for each E and ℓ fixed. Because of the smooth transition region (in the sense $k\rho \gg 1$), there are no more reflections at the boundaries of the field and we obtain the expected limit (3.6).

The common divergent term (the first term of (4.12)) is a purely classical quantity. It can be written as $\int_{-\infty}^{\infty} ds w_R(s/v)$, i.e., the time needed by a classical particle of velocity $v = \hbar k/m$ to cross the field region along its diameter, weighted by the function w_R .

It is worth noting that if $w_R(r)$ is assumed to be infinitely differentiable (i.e., $g(r)$ is infinitely differentiable with vanishing derivatives at $r = 0$), then the correction due to the transition region (the fourth term of (4.17)) vanishes faster than any power of the field gradient ρ^{-1} . On the other hand, if one lets $\rho \rightarrow 0$, w_R approach the step function χ_R and one recovers from (4.17) the result (4.8) with oscillating terms.

The present analysis can be extended to potentials v which are not necessarily rotation invariant. For this, one can follow the method of [20], replacing the characteristic function of the sphere by our w_R (4.10). Then, one obtains the result of the main theorem of [20] as $R \rightarrow \infty$, $\rho \rightarrow \infty$ without using the somewhat artificial spatial averaging procedure introduced there.

5. The spin scattering beyond the linear response

In this section, we consider the scattering of a neutral particle in a weak (but not necessarily infinitesimal) field. To do this, we first study the scattering, at fixed energy $E > \lambda$ and angular momentum ℓ , by the potential $v + \lambda w_R$ where w_R is as in (4.10). We shall show that in the limit $R \rightarrow \infty$, $\rho \rightarrow \infty$, the matrix elements $S_E^\ell(\lambda)$ factorise into a product of two terms, one due to the crossing of the region where λw_R acts and the other one due to the scattering by the potential v at energy $E - \lambda$. Equivalently, the effects of the potentials v and λw_R become additive in the phase shifts $\delta_E^\ell(\lambda)$.

Proposition 2. *Let $w_R(r)$ be defined as in (4.10). Assume that there exist $a > 0$ such that $\int_0^a dr r |v(r)| < \infty$ and for $r > a$, $v(r)$ is twice continuously differentiable and $v(r)$, $v'(r)$, $v''(r)$ are $O(r^{-\eta})$, $\eta > 2$. Then, for any fixed ℓ , $E > 0$ and $\lambda < E$, we have*

$$\delta_E^\ell(\lambda) = \int_0^\infty dr (\kappa(r) - k) + \delta_{E-\lambda}^\ell + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}) \quad (5.1)$$

where $\hbar\kappa(r) = \sqrt{2m(E - \lambda w_R(r))}$ and δ_E^ℓ are the phase shifts of the scattering system $(H_0, H_0 + v)$.

Proof. Throughout all the proof we set $R > a$. Given ℓ , $\lambda < E$ and $\varepsilon > 0$, there exist R sufficiently large such that (we recall that $0 \leq w_R(r) \leq 1$)

$$\gamma(r) \equiv v(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \lambda w_R(r) \leq E - \varepsilon, \quad r \geq R. \quad (5.2)$$

If $r \geq R$, we write the solution of (4.3) in the form (dropping now the indices ℓ, E)

$$u(r) = C_+(r)f_+(r) + C_-(r)f_-(r), \quad (5.3)$$

$$u'(r) = ik(r)(C_+(r)f_+(r) - C_-(r)f_-(r)) \quad (5.4)$$

where $u'(r) = du(r)/dr$,

$$\hbar k(r) = \sqrt{2m(E - \gamma(r))} \geq \sqrt{2m\varepsilon} > 0, \quad (5.5)$$

and $f_{\pm}(r)$ has the WKB form

$$f_{\pm}(r) = \frac{1}{\sqrt{k(r)}} \exp\left(\pm i \int_R^r ds k(s)\right). \quad (5.6)$$

It is not difficult to check that $u(r)$ verifies (4.3) if and only if the functions $C_{\pm}(r)$ obey the first order differential system

$$C'_{\pm}(r) = C_{\mp}(r) \frac{k'(r)}{2k(r)} \exp\left(\mp 2i \int_R^r ds k(s)\right) \quad (5.7)$$

with initial conditions determined by the continuity of $u(r)$ and $u'(r)$ at $r = R$

$$C_{\pm}(R) = \frac{1}{2} \left((k(R))^{1/2} u(R) \mp i (k(R))^{-1/2} u'(R) \right). \quad (5.8)$$

For $r \leq R$, one has $\lambda w_R(r) = \lambda$, thus $u(r) = u_{E-\lambda}^{\ell}(r)$ is the regular stationary solution of the radial equation with potential $v(r)$ and energy $E - \lambda$. Hence it has the asymptotic behavior

$$u(R) = u_{E-\lambda}^{\ell}(R) = A \sin(\kappa R - \ell\pi/2 + \delta_{E-\lambda}^{\ell}) + O(R^{-1}), \quad (5.9)$$

$$u'(R) = \left(u_{E-\lambda}^{\ell} \right)'(R) = A\kappa \cos(\kappa R - \ell\pi/2 + \delta_{E-\lambda}^{\ell}) + O(R^{-1}) \quad (5.10)$$

where $\hbar\kappa = \sqrt{2m(E - \lambda)}$, and A is a constant to be determined later. We observe that according to (5.2),(5.5) one has

$$k(r) = \kappa(r) + O(r^{-2}), \quad r \geq R, \quad (5.11)$$

with $\kappa(R) = \kappa$ and $\kappa(r) = k$ for r sufficiently large (since $w_R(r)$ has compact support). Combining (5.9), (5.10) and (5.11) in (5.8) gives

$$C_{\pm}(R) = \pm A \frac{\sqrt{\kappa}}{2i} \exp\left(\pm i(\kappa R - \ell\pi/2 + \delta_{E-\lambda}^{\ell})\right) + O(R^{-1}). \quad (5.12)$$

Furthermore, it is shown in appendix C that for $r \geq R$

$$C_{\pm}(r) = C_{\pm}(R) + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}). \quad (5.13)$$

This implies that for $r \geq R$

$$u(r) = C_+(R)f_+(r) + C_-(R)f_-(r) + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}) \quad (5.14)$$

is in fact given by the usual WKB approximation provided that R is sufficiently large and that the field gradient is sufficiently small in the transition region. In view of (5.6),(5.11), $f_{\pm}(r)$ have the asymptotic behavior

$$f_{\pm}(r) = \frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left(\pm i(kr - kR + \int_R^{\infty} ds(\kappa(s) - k))\right) + O(R^{-1}). \quad (5.15)$$

Thus, for $r \geq R$, r sufficiently large, (5.12),(5.15) and (5.14) lead to

$$u(r) = A \sqrt{\frac{\kappa}{k}} \sin\left(kr - \ell\pi/2 + (\kappa - k)R + \int_R^{\infty} ds(\kappa(s) - k) + \delta_{E-\lambda}^{\ell}\right) + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}). \quad (5.16)$$

The comparison of (5.16) with (4.4) shows that $A = \sqrt{k/\kappa}$. Moreover, since $S_E^{\ell}(\lambda)$ is continuous in λ , we choose the determination of $\delta_E^{\ell}(\lambda)$ which is continuous in λ with $\delta_E^{\ell}(\lambda = 0) \equiv \delta_E^{\ell}$ and conclude from (5.16) that (5.1) is true.

We see that the phase shifts have a well defined asymptotic behavior (5.1) without oscillations. This has to be contrasted with the case $w_R(r) = \chi_R(r)$ (abrupt switching on) which produces the phase shifts

$$\delta_E^{\ell}(\lambda) = -kR + \arctan\left(\frac{k}{\kappa} \tan(\kappa R - \ell\pi/2 + \delta_{E-\lambda}^{\ell})\right) + O(R^{-1}). \quad (5.17)$$

If one calculate $2\hbar \partial\delta_E^{\ell}(\lambda)/\partial\lambda|_{\lambda=0}$ from (5.1) and (5.17) respectively, one recovers of course (4.12) and (4.8).

The expression (5.1) has the following interpretation: the Eisenbud-Wigner time delay associated with the scattering of the particle by the potential $v + \lambda w_R$ i.e., $\tau_E^{\ell}(\lambda) = 2\hbar \partial\delta_E^{\ell}(\lambda)/\partial E$, is equal to the sum of two contributions

$$\tau_E^{\ell}(\lambda) = \tau_E^{\text{cl}}(\lambda) + \tau_{E-\lambda}^{\ell} \quad (5.18)$$

where

$$\tau_E^{\text{cl}}(\lambda) = \int_0^{\infty} dr \left(\sqrt{\frac{2m}{E - \lambda w_R(r)}} - \sqrt{\frac{2m}{E}} \right) \quad (5.19)$$

and $\tau_{E-\lambda}^{\ell}$ is the time delay due to the potential v alone at energy $E - \lambda$. It is not hard to check that as $R \rightarrow \infty$, $\tau_E^{\text{cl}}(\lambda)$ is the asymptotic form of the time delay corresponding to the scattering of a classical particle by the potential $\lambda w_R(r)$.

The expression (5.1) may also be compared to the standard WKB phase shifts [21]. The difference is that here the semiclassical treatment applies only to the transition region for λw_R (because of its weak gradient), whereas the full quantum mechanical scattering by the potential v is taken into account.

The main consequence of the result (5.1) is that, in the limit $R \rightarrow \infty$ and $\rho \rightarrow \infty$, the potential λw_R has no effects on the scattering by v , except for the energy shift $E - \lambda$ and the additional classical time delay (5.19). This is because the first factor in (5.1) is an overall phase depending only on the energy and thus commuting with the momentum operator. More specifically, if $F_E(\hat{p})$ is any function of the momentum \vec{p} on the energy shell (i.e., depending only on the angles $\hat{p} = \vec{p}/|\vec{p}|$ of \vec{p} with $|\vec{p}| = (2mE/\hbar^2)^{1/2}$ fixed), the matrix elements of the asymptotic operator

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \rho \rightarrow \infty}} \langle \ell, m | S_E^\dagger(\lambda) F_E(\hat{p}) S_E(\lambda) | \ell', m' \rangle \\ &= \lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ \rho \rightarrow \infty}} S_E^\ell(\lambda) S_E^{\ell'}(\lambda) \langle \ell, m | F_E(\hat{p}) | \ell', m' \rangle \\ &= e^{2i(\delta_{E-\lambda}^\ell - \delta_{E-\lambda}^{\ell'})} \langle \ell, m | F_E(\hat{p}) | \ell', m' \rangle \end{aligned} \quad (5.20)$$

converge to those due to the potential v alone. In particular, if $v = 0$, there is no scattering at all and the cross section vanishes.

We consider now the scattering of a neutral particle of spin s . For each E and ℓ , $S_E^\ell(\lambda)$ is now a $(2s+1) \times (2s+1)$ matrix, diagonal in the basis of eigenvectors of Σ_z , with elements $S_E^\ell(m_s, \lambda)$, $-s \leq m_s \leq s$ obtained by replacing λ by $m_s \lambda$ in (5.1). For a spin-1/2, we find according to (5.1)

$$\langle \Sigma_\pm \rangle_{E, \ell}^{\text{out}}(\lambda) = e^{\pm i \alpha_E^\ell(w_R, \lambda)} \langle \Sigma_\pm \rangle^{\text{in}} \quad (5.21)$$

with

$$\alpha_E^\ell(w_R, \lambda) = \alpha_{0E}(w_R, \lambda) + 2(\delta_{E+\hbar\lambda/2}^\ell - \delta_{E-\hbar\lambda/2}^\ell) + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}), \quad (5.22)$$

$$\alpha_{0E}(w_R, \lambda) = 2 \int_0^\infty dr (\kappa_-(r) - \kappa_+(r)), \quad (5.23)$$

$$\hbar \kappa_\pm(r) = \sqrt{2m(E \mp (\hbar\lambda/2)w_R(r))}. \quad (5.24)$$

When there is no dispersion in energy, the spin vector $\langle \vec{\Sigma} \rangle^{\text{in}} = (\langle \Sigma_x \rangle^{\text{in}}, \langle \Sigma_y \rangle^{\text{in}})$ undergoes a rotation in the (x, y) plane of angle $\alpha_E^\ell(w_R, \lambda)$ which is the sum of two terms. The first of these two terms, $\alpha_{0E}(w_R, \lambda)$, diverges as $R \rightarrow \infty$ and is the rotation angle of the outgoing spin vector in the magnetic field when the scattering potential v is set equal to zero. Therefore, the difference

$$\alpha_E^\ell(w_R, \lambda) - \alpha_{0E}(w_R, \lambda) = 2\lambda\hbar \frac{\delta_{E+\hbar\lambda/2}^\ell - \delta_{E-\hbar\lambda/2}^\ell}{\lambda\hbar} + O(R^{-1}) + O(\rho^{-1}) \quad (5.25)$$

has a well defined limit as $R \rightarrow \infty$ and $\rho \rightarrow \infty$ which is the generalization of (4.19) for a spin-1/2 at fixed energy E and ℓ , for a cut off function given by (4.10). At the first order in λ , one recovers the Eisenbud-Wigner time-delay and higher order terms in λ give access to the higher order derivatives of the phase shifts δ_E^ℓ with respect to the energy.

However, if the incoming state φ has some dispersion in energy (but with no contributions below $\lambda\hbar/2$), (5.21) has to be replaced by

$$\langle \Sigma_\pm \rangle_\ell^{\text{out}}(\lambda) = \langle \Sigma_\pm \rangle^{\text{in}} \int dE |\varphi_\ell(E)|^2 e^{\pm i\alpha_E^\ell(w_R, \lambda)}. \quad (5.26)$$

Since $\alpha_E^\ell(w_R, \lambda)$ varies rapidly for large R , $\langle \Sigma_\pm \rangle_\ell^{\text{out}}(\lambda)$ is now subjected to an attenuation (for instance, an integration by parts of (5.26) gives $|\langle \Sigma_\pm \rangle_\ell^{\text{out}}(\lambda)| = O(R^{-1})$ as $R \rightarrow \infty$). This attenuation is due to fact that in the field region, the spin up and down parts of the wave packet (relative to the field direction) have different effective momenta $\hbar\kappa_\pm(r)$ (see (5.24)) and thus propagate at different speeds. This produces a spatial splitting of the incoming wave packet which is the reason for the attenuation. This effect has been discussed in the context of neutron beam experiments [22]. It is easy to check on (5.26) that this attenuation is negligible if $\sqrt{mE^{-3}}\lambda\Delta R \ll 1$ where Δ is the energy width of the wave packet peaked about E .

Obviously, all the results of sections 4 and 5 can easily be specialized to the one dimensional scattering problem. We define the cut off function as in (4.10) with $r = |x|$, $x \in \mathbb{R}$. If the potential is invariant under the reflection $x \rightarrow -x$, the scattering operator at fixed energy is diagonal in the representation of even and odd functions of the momentum $\hbar k$. Then, $\ell = 0, 1$, where 0 corresponds to the odd functions and 1 to the even ones. The phase shifts $\delta_E^0(\lambda)$ and $\delta_E^1(\lambda)$ are connected with the transmission and reflection coefficients by

$$e^{2i\delta_E^0(\lambda)} = \mathcal{T}_E(\lambda) - \mathcal{R}_E(\lambda), \quad e^{2i\delta_E^1(\lambda)} = \mathcal{T}_E(\lambda) + \mathcal{R}_E(\lambda) \quad (5.27)$$

and the results of propositions 1 and 2 are the same for $\delta_E^0(\lambda)$ and $\delta_E^1(\lambda)$.

In one dimension, it is possible to apply the WKB method of proposition 2 to a potential v which is not necessarily invariant under space reflection (but still keeping the same form (4.10) of w_R). Working now in the two valued energy representation specified by E and $k/|k|$, the S -operator of the scattering system $(H_0, H_0 + v)$, on the energy shell, is given by the following 2×2 unitary matrix

$$S_E = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_E & \mathcal{R}'_E \\ \mathcal{R}_E & \mathcal{T}_E \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

In (5.28) \mathcal{T}_E and \mathcal{R}_E are the transmission and reflection coefficients for a particle with energy E coming from the left and \mathcal{R}'_E is the reflection coefficient for the particle coming from the right. The equivalent of proposition 2 is now that $S_E(\lambda)$, $\lambda < E$, is asymptotic

to $T_{0E}(\lambda) S_{E-\lambda}$ as $R \rightarrow \infty$ and $\rho \rightarrow \infty$, where $T_{0E}(\lambda) = \exp(2i \int_0^\infty dr (\kappa(r) - k))$ is the transmission coefficient for the scattering system without the potential v . Notice that $|T_{0E}(\lambda)| = 1$ i.e., the potential λw_R causes no reflections. Since $T_{0E}(\lambda)$ is a pure phase factor, we find that, at fixed energy E and for a spin-1/2, the length of the difference of the spin vector in the (x, y) plane

$$|\langle \vec{\Sigma} \rangle_E^{\text{out}}(\lambda) - \langle \vec{\Sigma} \rangle_{0E}^{\text{out}}(\lambda)| = 2\lambda\hbar |\langle \vec{\Sigma} \rangle^{\text{in}}| \left| \left\langle S_{E-\lambda\hbar/2}^\dagger \left(\frac{S_{E+\lambda\hbar/2} - S_{E-\lambda\hbar/2}}{\lambda\hbar} \right) \right\rangle_E \right| + o(1) \quad (5.29)$$

has again a well defined limit as $R \rightarrow \infty$ and $\rho \rightarrow \infty$.

6. Concluding remarks

The scattering of a quantum mechanical particle by a (non random) potential (here $v + \lambda w$) is a fully coherent process: all interactions, wherever they take place, contribute coherently to the wave function. By a rigorous quantum mechanical treatment of the full process (field and potential), we have shown that the spin clock agrees with the (classic) Eisenbud-Wigner time delay, at fixed energy as well as for wave packets, under the following conditions:

- (i) one considers the average value of the total outgoing spin (i.e., summing up the contributions of all scattering directions);
- (ii) the magnetic field is switched on smoothly in space in a spherically symmetric region;
- (iii) one retains the linear response term in the field strength;
- (iv) the field region is eventually extended to the whole space.

Under the same conditions (i),(ii),(iv), we have also investigated the functioning of the spin clock beyond the linear response regime. At fixed energy, a relevant information can be obtained on finite energy differences of phase shifts. When there is some dispersion in energy, the outgoing spin magnitude is attenuated because of a (Stern-Gerlach) splitting of the spin component waves inside the field region. This confirms the view that the apparent pure spin rotation occurring in linear response should be interpreted as a coherent interference between the spin component waves in the field region, rather than as a classical Larmor precession (see [22] for a discussion of this point).

Conditions (i) and (iv) may also be dropped by performing a spin measurement in a definite outgoing direction and/or considering cases where the magnetic field acts only locally on some region of microscopic size.

It is certainly of interest to investigate what information can be obtained on tunneling processes from a partial spin measurement (for instance, in one dimension, the spin associated with transmitted or reflected waves separately; see the comment at the end of section 3). This aspect was not discussed in this paper but we shall come back to this point in another work in relation with the concept of "angular time delay" (see for instance [23]).

If the magnetic field has a strictly local action in some region, there will be in principle quantum mechanical interferences due to the non vanishing gradients at the finite distance boundaries of this region. To what extent they can be disentangled from the scattering waves due to the potential v has to be examined in each case.

The sojourn time has also a local character. As it was emphasized in [24] it is an idealized quantity obtained by a continuous observation in the limit of weak disturbance of the system by the measurement procedure. In fact, the linear response of the scattering system to an applied field, as described in section 2, precisely provides such a measurement. We understand then that the sojourn time unavoidably embodies also the physical consequences of the spatial switching on of the field specified by a choice of the cut off function w .

Many studies are devoted to local tunneling times (see for instance [1,25] and references cited there) but, in our opinion (and this is also a conclusion in [1]), the Eisenbud-Wigner phase shift is the only concept of time delay intrinsically attached to the potential v : it has to be a non local quantity by the very nature of quantum mechanics (a wave packet cannot have compact support for all times).

A final remark is in order. To our knowledge, in the present work as well as in almost all the existing literature, the cut off function w is always chosen spherically symmetric (or reflection invariant in one dimension). Exceptions are ref. [14] concerning the one dimensional case and the treatment of [26] for the trace $\text{Tr}\tau_E$ of the time delay operator. A spherically symmetric cut off has the advantage to lead to the expected result (the usual Eisenbud-Wigner phase shift) and to facilitate the analysis (for instance a simple application of the WKB method of proposition 2 is only possible with the radial ordinary differential equation). We think that the reason for this choice is in fact more fundamental: if more general cut off functions are allowed the convergence (3.5) is no more guaranteed [27].

Acknowledgments

We thank J. -P. Marchand and A. Joye for fruitful and informative discussions.

Appendix A

In this appendix, we establish the formula (2.6) for a class of spherically symmetric potentials. We have from (2.3)

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} S_t(\lambda) = -\frac{i}{\hbar} \Omega_{+,t}^\dagger(\lambda) A_t(\lambda) \Omega_{-,t}(\lambda) \quad (\text{A.1})$$

with

$$A_t(\lambda) = \int_{-t}^t ds V_s^\dagger(\lambda) w V_s(\lambda), \quad (\text{A.2})$$

$$\| A_t(\lambda) \| \leq 2t \| w \| . \quad (\text{A.3})$$

One proceeds with the following steps:

- (i) the strong limits (2.1) hold on $L^2(\mathbb{R}^3)$ uniformly with respect to λ ($|\lambda| \leq \lambda_0$);
- (ii) there exist a dense set $\mathcal{D} \subset L^2(\mathbb{R}^3)$ such that $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} A_t(\lambda)\Omega_-(\lambda)\varphi = A(\lambda)\Omega_-(\lambda)\varphi$, uniformly with respect to λ , on the set $\Omega_-(\lambda)\varphi$, $\varphi \in \mathcal{D}$, where $A(\lambda) = A_\infty(\lambda)$ is given by the integral (A.2) with infinite integration range;
- (iii) $s\text{-}\lim_{t \rightarrow \infty} A_t(\lambda)\Omega_{-,t}(\lambda)\varphi = A(\lambda)\Omega_-(\lambda)\varphi$, $\varphi \in \mathcal{D}$, uniformly with respect to λ .

The assertions (i) and (iii) imply that for $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ and $\varphi \in \mathcal{D}$, the sequence of derivatives

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \lambda} (\psi, S_t(\lambda)\varphi) &= -\frac{i}{\hbar} \lim_{t \rightarrow \infty} (\Omega_{+,t}(\lambda)\psi, A_t(\lambda)\Omega_{-,t}(\lambda)\varphi) \\ &= -\frac{i}{\hbar} (\psi, \Omega_+^\dagger(\lambda)A(\lambda)\Omega_-(\lambda)\varphi) \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

converge uniformly with respect to λ . This justifies the exchange of the infinite time limit with the λ derivative and gives (2.6) when λ is set equal to zero in (A.4). The point (i) follows from the standard Cook estimate

$$\begin{aligned} \| (\Omega_\pm(\lambda) - V_t^\dagger(\lambda)U_t)\varphi \| &\leq \left\| \int_t^{\pm\infty} ds \| (v + \lambda w)U_t\varphi \| \right\| \\ &\leq \left\| \int_t^{\pm\infty} ds \| v U_t\varphi \| \right\| + \lambda_0 \left\| \int_t^{\pm\infty} ds \| w U_t\varphi \| \right\| \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

which is obviously uniform with respect to λ , $|\lambda| \leq \lambda_0$. To establish (ii), we show that $(A_{t_2}(\lambda) - A_{t_1}(\lambda))\Omega_-(\lambda)\varphi$, $t_2 > t_1$, $\varphi \in \mathcal{D}$, form a strong Cauchy sequence uniform in λ . We omit the variable λ from now on, remembering that the total potential is $v + \lambda w$. We use the inequalities

$$\begin{aligned} \| (A_{t_2} - A_{t_1})\Omega_-\varphi \| &= \left\| \int_{t_1}^{t_2} ds \frac{d}{ds} A_s \Omega_-\varphi \right\| \\ &\leq \int_{-t_2}^{-t_1} ds \| w V_s \Omega_-\varphi \| + \int_{t_1}^{t_2} ds \| w V_s \Omega_-\varphi \| \\ &\leq \int_{-t_2}^{-t_1} ds \| w U_s \varphi \| + \| w \| \int_{-t_2}^{-t_1} ds \| (V_s \Omega_- - U_s)\varphi \| \\ &\quad + \int_{t_1}^{t_2} ds \| w U_s S \varphi \| + \| w \| \int_{t_1}^{t_2} ds \| (V_s \Omega_- - U_s S)\varphi \|. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

We note that the integrability of the functions occurring in (A.6) is precisely the condition under which the existence of the time delay is proven in [12], i.e., it holds if $\mathcal{D} = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}^3); \hat{\varphi}(\vec{k}) = \int d^3x e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}\varphi(\vec{x})$ is three times continuously differentiable with compact support and no support in a neighborhood of $\vec{k} = 0\}$, v is spherically symmetric and $v(r) = O(r^{-\frac{5}{2}-\epsilon})$ (we recall that w has compact support). The analysis of [12] relies on the Cook estimate (A.5) and on the finiteness of the moments

$$\int dr r^\gamma |v(r) + \lambda w(r)| \leq \int dr r^\gamma |v(r)| + \lambda_0 \int dr r^\gamma |w(r)|, \quad 0 \leq \gamma \leq \frac{3}{2} + \epsilon. \quad (\text{A.7})$$

Both estimates (A.5) and (A.7) are uniform with respect to λ , and this complete the proof of (ii). For (iii), we have with (A.3)

$$\begin{aligned} \| (A_t \Omega_{-,t} - A \Omega_-) \varphi \| &\leq \| (A_t - A) \Omega_- \varphi \| + \| A_t \| \| (\Omega_{-,t} - \Omega_-) \varphi \| \\ &\leq \| (A_t - A) \Omega_- \varphi \| + 2 \| w \| t \| (\Omega_{-,t} - \Omega_-) \varphi \|. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

The first term in the r.h.s. of (A.8) tends to zero uniformly with respect to λ by (ii). So does the second term since by the Cook estimate $\| (\Omega_{-,t} - \Omega_-) \varphi \| = O(t^{-1-\varepsilon})$, $\varphi \in \mathcal{D}$, uniformly with respect to λ (see [12]). This completes the proof of (2.6) for $\varphi \in \mathcal{D}$ and for spherically symmetric potentials v decreasing at infinity more rapidly than $r^{-5/2}$. The proof could be extended to non spherically symmetric potentials by the methods of [13].

Appendix B

We give here a proof of (4.15) of section 4. Using the method of variation of constants it is not difficult to show that the solution of (4.3) with asymptotic behavior (4.4) obeys the Volterra type integral equation (see [28] for the method)

$$u^\ell(k, r) = u_0^\ell(k, r) + u_1^\ell(k, r), \quad \hbar k = \sqrt{2mE}, \quad (\text{B.1})$$

with

$$u_0^\ell(k, r) = \cos \delta^\ell(k) j_\ell(kr) + \sin \delta^\ell(k) n_\ell(kr), \quad (\text{B.2})$$

$$u_1^\ell(k, r) = \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_r^\infty ds G_k^\ell(r, s) v(s) u^\ell(k, s), \quad (\text{B.3})$$

$$G_k^\ell(r, s) = n_\ell(ks) j_\ell(kr) - n_\ell(kr) j_\ell(ks), \quad (\text{B.4})$$

where $j_\ell(x)$ and $n_\ell(x)$ are the usual Riccati-Bessel and Riccati-Newmann functions with asymptotic behavior

$$\begin{aligned} j_\ell(x) &= \sin(x - \ell\pi/2) + O(1/x), \\ n_\ell(x) &= \cos(x - \ell\pi/2) + O(1/x). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Inserting (B.1) into (4.14) gives (dropping now the indices E and ℓ)

$$h(k, r) = \sum_{\alpha, \beta=0}^1 \frac{1}{2k} \overbrace{\left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial r} \frac{\partial u_\beta}{\partial k} - u_\alpha \frac{\partial^2 u_\beta}{\partial r \partial k} \right)}^{A_{\alpha, \beta}(k, r)}(k, r). \quad (\text{B.6})$$

We first derive the asymptotic behavior of $A_{0,0}(k, r)$, noting that under the condition (4.11), the phase shifts $\delta^\ell(k)$ are continuously differentiable for $k \neq 0$ (see [28]). One obtains, setting $x = kr$

$$\begin{aligned} A_{0,0}(k, r) &= \cos^2 \delta(k) \left(k \frac{d\delta(k)}{dk} (n'j - nj')(x) + x(j''j - j'^2)(x) + j'(x)j(x) \right) \\ &\quad + \sin^2 \delta(k) \left(k \frac{d\delta(k)}{dk} (n'j - nj')(x) + x(n''n - n'^2)(x) + n'(x)n(x) \right) \\ &\quad + \sin \delta(k) \cos \delta(k) \left(x(j''n - j'n')(x) + (n''j - n'j')(x) + (j'n + n'j)(x) \right). \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Using now the following properties of the spherical Bessel functions

$$\begin{aligned}
j''(x) &= -j(x) + O(x^{-2}), & n''(x) &= -n(x) + O(x^{-2}), \\
j'(x) &= n(x) + O(x^{-2}), & n'(x) &= -j(x) + O(x^{-2}), \\
n^2(x) + j^2(x) &= 1 + O(x^{-2}),
\end{aligned} \tag{B.8}$$

(B.7) becomes

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2k} A_{0,0}(k, r) &= \frac{1}{2} \frac{d\delta(k)}{dk} + \frac{r}{2} \\
&- \frac{1}{4k} (j(kr) \cos \delta(k) + n(kr) \sin \delta(k))(n(kr) \cos \delta(k) - j(kr) \sin \delta(k)) + O(r^{-1}) \\
&= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2 k}{2m} \frac{d\delta_E^\ell}{dE} + \frac{r}{2} - \frac{1}{4k} \sin(2kr - \ell\pi + 2\delta_E^\ell) + O(r^{-1})
\end{aligned} \tag{B.9}$$

where the last equality follows from (B.5). This is the expected asymptotic behavior of $h_E^\ell(r)$. To complete the proof of (4.15) it remains to show that under the conditions (4.11) the three last terms in the sum (B.6) do not contribute as $r \rightarrow \infty$. As a consequence of the fact that the spherical Bessel functions are uniformly bounded away from the origin, we have for $k \neq 0$ and $r \geq 1$

$$u_0^\ell(k, r), \frac{du_0^\ell}{dr}(k, r) = O(1), \quad \frac{du_0^\ell}{dk}(k, r), \frac{d^2u_0^\ell}{drdk}(k, r) = O(r), \tag{B.10}$$

and also, solving the integral equation (B.1)-(B.4) by iteration

$$u^\ell(k, r) = O(1), \quad \frac{du^\ell}{dk}(k, r) = O(r). \tag{B.11}$$

Then one deduces from (B.3)

$$u_1^\ell(k, r), \frac{du_1^\ell}{dr}(k, r) = O\left(\int_r^\infty ds |v(s)|\right), \tag{B.12}$$

$$\frac{du_1^\ell}{dk}(k, r), \frac{d^2u_1^\ell}{drdk}(k, r) = O\left(\int_r^\infty ds s |v(s)|\right), \tag{B.13}$$

(B.12) and (B.13) imply that all the terms $A_{\alpha,\beta}(k, r)$, $(\alpha, \beta) \neq (0, 0)$ are $O(N(r))$.

Appendix C

We indicate here a proof of (5.13) of section 5. For this, we write (5.7) as an integral equation

$$C_{\pm}(r) = C_{\pm}(R) + \Delta_{\pm}(r) \quad (\text{C.1})$$

where

$$\Delta_{\pm}(r) = \frac{1}{2} \int_R^r ds \frac{k'(s)}{k(s)} C_{\mp}(s) e^{\mp 2i \int_R^s ds' k(s')}. \quad (\text{C.2})$$

An integration by parts of (C.2) gives

$$\begin{aligned} \Delta_{\pm}(r) &= \mp \frac{1}{4i} \frac{k'(s)}{k^2(s)} C_{\mp}(s) e^{\mp 2i \int_R^s ds' k(s')} \Big|_R^r \\ &\quad - \frac{1}{4} \int_R^r ds \left(\frac{k'(s)}{k^2(s)} C_{\mp}(s) \right)' e^{\mp 2i \int_R^s ds' k(s')}. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

We know that the regular solution $u(r)$ of (4.3) and its derivative $u'(r)$ are bounded (see for instance appendix B); the definitions (5.3),(5.4) imply that the same is true for $C_+(r)$ and $C_-(r)$. Then, using also (5.5), it is a simple matter to check that for $s \geq R$

$$\left| \frac{k'(s)}{k^2(s)} C_{\mp}(s) \right| \leq M_1 |\gamma'(s)|, \quad (\text{C.4})$$

$$\left| \left(\frac{k'(s)}{k^2(s)} C_{\mp}(s) \right)' \right| \leq M_2 (\gamma'(s))^2 + M_3 |\gamma''(s)|. \quad (\text{C.5})$$

To obtain (C.5) we have taken into account that, by (5.7), $C'_{\pm}(s)$ has the same bound as (C.4). Introducing (C.4) and (C.5) into (C.3) gives, after integrating $(\gamma'(s))^2$ by parts

$$|\Delta_{\pm}(r)| \leq M_4 \sup_{s \geq R} |\gamma'(s)| + M_5 \int_R^{\infty} ds |\gamma''(s)|. \quad (\text{C.6})$$

In view of (4.10) and with the conditions assumed for the potential v , one has the estimates

$$\sup_{s \geq R} |\gamma'(s)| \leq \rho^{-1} \sup_{s \geq 0} |g'(s)| + O(R^{-\eta}) + O(R^{-3}), \quad (\text{C.7})$$

$$\int_R^{\infty} ds |\gamma''(s)| \leq \rho^{-1} \int_0^{\infty} ds |g''(s)| + O(R^{-\eta+1}) + O(R^{-3}), \quad (\text{C.8})$$

implying that (5.13) holds when $\eta \geq 2$.

References

- [1] E. H. Hauge, J.A. Støvneng: "Tunneling times: a critical review". *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917–936 (1989).
- [2] A. I. Baz': "Lifetime of intermediate states". *Sov. J. Nucl. Phys.* **4**, 182–188 (1967).
- [3] V. F. Rybachenko: "Time of penetration of a particle through a potential barrier". *Sov. J. Nucl. Phys.* **5**, 635–639 (1967).
- [4] J. P. Falck, E. H. Hauge: "Larmor clock reexamined". *Phys. Rev. B* **38**, 3287–3297 (1988).
- [5] Ph. A. Martin: "Time delay of quantum scattering processes". *Acta Phys. Austriaca, Suppl.* **23**, 159–208 (1981).
- [6] W. Amrein, J. M. Jauch, K. B. Sinha: "Scattering Theory in Quantum Mechanics". Benjamin, Reading Mass. (1977).
- [7] W. Jaworski, D. Wardlaw: "Sojourn time, sojourn time operators, and perturbation theory for one-dimensional scattering by a potential barrier". *Phys. Rev. B* **40**, 6219–6218 (1989).
- [8] W. Jaworski, D. Wardlaw: "Sojourn-time operator approach to interaction time in quantum scattering: General formulation for arbitrary scattering systems". *Phys. Rev. A* **45**, 292–306 (1992).
- [9] B. J. Verhaar, A. M. Schulte, J. De Kam: "On the lifetime of the intermediate system in quantum-mechanical collisions". *Physica* **91 A** 119–132 (1978).
- [10] F. T. Smith: "Lifetime matrix in collision theory". *Phys. Rev.* **118**, 349–356 (1960).
- [11] Ph. A. Martin: "On the time-delay of simple scattering systems". *Comm. Math. Phys.* **47**, 221–227 (1976).
- [12] K. Gustafson, K. B. Sinha: "On the Eisenbud-Wigner formula for time-delay". *Lett. Math. Phys.* **4**, 381–385 (1980).
- [13] W. Amrein, M. B. Cibils: "Global and Eisenbud-Wigner time-delay in scattering theory". *Helv. Phys. Acta* **60**, 481–500 (1987).
- [14] W. Jaworski, D. Wardlaw: "Time delay in tunneling: transmission and reflection time delays". *Phys. Rev. A* **37**, 2843–2854 (1988).
- [15] A. Jensen: "Time-delay in potential scattering theory, some geometric results". *Comm. Math. Phys.* **82**, 435–456 (1981).
- [16] X. -P. Wang: "Time-delay operator for a class of singular potentials". *Helv. Phys. Acta* **60**, 501–509 (1987).
- [17] M. Büttiker: "Larmor precession and the traversal time for tunneling". *Phys. Rev. B* **27**, 6178–6188 (1982).
- [18] W. Jaworski, D. Wardlaw: "Connection between complex interaction times and the sojourn-time operator". *Phys. Rev. A* **43**, 5137–5140 (1991).

- [19] A. Messiah: “*Quantum Mechanics*”. North-Holland Publ. Comp. Amsterdam (1961).
- [20] J. M. Jauch, J. -P. Marchand: “*The delay time operator for simple scattering systems*”. *Helv. Phys. Acta* **40**, 217–229 (1967).
- [21] M. V. Berry, K. E. Mount: “*Semiclassical approximations in wave mechanics*”. *Rep. Prog. Phys.* **35**, 316–394 (1972).
- [22] F. Mezei: “*Zeeman energy, interference and neutron spin echo: a minimal theory*”. *Physica B* **151**, 74–81 (1988).
- [23] D. Bollé, T. A. Osborn: “*Concepts of multiparticle time delay*”. *Phys. Rev. D* **13**, 299–311 (1991).
- [24] W. Jaworski: “*The concept of a time-of-sojourn operator and spreading of wave packets*”. *J. Math. Phys.* **30**, 1505–1514 (1989).
- [25] H. A. Fertig: “*Traversal-Time Distribution and the Uncertainty Principle in Quantum Tunneling*”. *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2321–2324 (1990).
- [26] J. M. Jauch, B. N. Misra, K. B. Sinha: “*Time-delay in scattering processes*”. *Helv. Phys. Acta* **45**, 398–426 (1972).
- [27] M. Sassoli de Bianchi, Ph. A. Martin: “*On the definition of time delay in scattering theory*”. *Helv. Phys. Acta* **65**, 1119–1126 (1992).
- [28] V. De Alfaro, T. Regge: “*Potential Scattering*”. North-Holland Publ. Comp. Amsterdam (1965).

V. Précession - versus - effet Stern-Gerlach

1. Introduction

L'interprétation de la phase accumulée par un neutron traversant un champ magnétique a été l'objet d'une certaine controverse, surtout en relation avec le problème de l'observabilité du changement de signe de la fonction d'onde spinorielle soumise à une rotation de 2π radians, dans les expériences d'interférométrie neutronique [Ra].

Rappelons que pour un spin $1/2$, l'opérateur unitaire de rotation autour de l'axe z est de la forme $R_z(\theta) = e^{-i\theta\sigma_z/2}$, avec σ_z la matrice de Pauli le long de l'axe z . Pour $\theta = 2\pi$ on a donc $R_z(2\pi) = -I$, et c'est seulement pour $\theta = 4\pi$ qu'on obtient $R_z(2\pi) = I$. En d'autres termes, un spineur doit être tourné de 4π radians pour retrouver son vecteur d'état initial. D'autre part, l'opérateur d'évolution pour un spin $1/2$ dans un champ magnétique homogène est donné par $U(t) = e^{i\mu B t \sigma_z / \hbar}$ et est donc équivalent à la rotation $R_z(-\mu B t / \hbar)$.

Dans les expériences d'interférométrie neutronique un faisceau de neutrons est divisé en deux parties à l'aide d'un cristal (par réflexion de Bragg). Les deux faisceaux sont ensuite recombinés à l'aide d'un deuxième cristal et finissent par interférer sur un troisième. Le premier faisceau, de référence, est décrit par la fonction d'onde ψ_1 . Le deuxième faisceau traverse une région de champ magnétique constant et sa fonction d'onde est ψ_2 . L'expérience consiste alors à mesurer l'intensité $I = \|\psi\|^2$ de l'onde superposée $\psi = \psi_1 + \psi_2$. Si ψ_2 a traversé un champ magnétique dans la direction z , on a par l'argument de la précession $\psi_2 = R_z(\theta)\psi_1$, et on obtient pour l'intensité I la modulation

$$I(\theta) = \frac{I(0)}{2} \left(1 + \cos \frac{\theta}{2} \right) \quad (1.1)$$

qui a la périodicité de 4π observée dans les expériences d'interférométrie neutronique [Ra].

Reste le problème de l'interprétation des résultats de l'expérience: savoir si on doit attribuer la phase accumulée par le neutron à la précession du spin dans le champ

magnétique ou, plutôt, à un effet Stern-Gerlach longitudinal (sans invoquer la lois de transformation du spin) qui est lié à l'accélération et décélération des composantes "up" et "down" à l'entrée et à la sortie de ce dernier. Nous verrons qu'il est possible d'utiliser le concept de temps de séjour pour trancher entre ces deux alternatives. L'idée est la suivante: si la phase accumulée θ est à attribuer à la précession du spin (comme pour un spin dans un champ homogène) alors, même au delà de l'approximation linéaire, elle doit être de la forme $\theta = -\mu BT/\hbar$, avec T qui est le temps passé par le neutron dans la région du champ magnétique. Nous verrons dans l'article qui suit qu'il n'en est rien.

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *Spin précession revisited*, Found. Phys., **24**, 1994, pp. 1371-1378.

Spin precession revisited

Ph. A. Martin and M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. The passage of a spin 1/2 neutral particle through a region of uniform magnetic field and the corresponding precession mechanism is analyzed from the view point of scattering theory, with particular consideration on the role of the field boundaries.

For pedagogical purposes, in several good books on basic quantum mechanics, the Larmor precession of a spin 1/2 particle in a uniform magnetic field is presented as the simplest example of a quantum dynamical system [1]. For a magnetic field in the z -direction, the time-evolution operator is $U(t) = \exp(i\mu B\sigma_z t/\hbar)$ with $B > 0$ the field strength and μ the magnetic moment of the particle (μ is negative for a neutron). Using the commutation relations for the spin components $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, $i = x, y, z$ (σ_i are the Pauli matrices) one finds that the spin operators $S_{\pm} = S_x \pm iS_y$ evolve, in the Heisenberg picture, according to

$$S_{\pm}(t) = S_{\pm} e^{\pm i\omega t}. \quad (1)$$

In other terms, the spin vector $\vec{S}(t) = (S_x(t), S_y(t))$ undergoes a rotation with constant angular velocity $\omega = -2\mu B/\hbar$, the Larmor frequency. The motion (1) is formally the same as that of a classical magnetic moment in a uniform field.

The price to be paid for this beautiful simplicity is to ignore the translational degrees of freedom of the particle. We have of course to treat a more general dynamical problem (considering here a neutral particle with position \vec{x} and momentum \vec{p}) governed by the Hamiltonian

$$H = \frac{|\vec{p}|^2}{2m} + V(\vec{x}) - \mu B(\vec{x})\sigma_z \quad (2)$$

where $B(\vec{x})$ is constant in a region D of finite extension and $V(\vec{x})$ represents some additional spin-independent potential. If the particle remains localized in D , the picture (1) is correct. For instance, let the state of the particle be of the form $\varphi_E \otimes \chi$ where χ is any spin state and φ_E is a bound state of $V(\vec{x})$ with energy E . If the spatial support of $\varphi_E(\vec{x})$ is well confined inside D , we may neglect the effects of the field boundaries, and treat $B(\vec{x})$ as constant in (2) when acting on $\varphi_E(\vec{x})$.

However, the situation is very different if the particle belongs to a beam traveling through the region where the magnetic field is acting: one has to take into account that the particle has to enter and leave the field region.

The problem of a traveling beam has been investigated in the context of neutron interferometry experiments, in relation with the question of the observability of the sign reversal of a spinor wave function subjected to a 2π -rotation, see [2]-[5] and the literature quoted in these references. It is also discussed within the theory of the Larmor clock, a device proposed to measure tunneling times through potential barriers by means of the spin precession [6]-[9]. It has been recognized in many works that the spin motion of a neutral particle crossing a region of constant magnetic field shows a Larmor precession as in (1) under the following conditions:

- (i) reflections of the wave packet on the field boundaries are disregarded;
- (ii) the field strength is weak.

We do not claim for originality in our forthcoming discussion of the spin precession mechanism, which is lucidly analyzed in [5], for instance. But in view of various controversies that have appeared in this large literature, we feel of interest to make the above mentioned points (i) and (ii) mathematically precise in a simple situation, especially concerning the role played by the field boundaries. In this respect, we hope that this note will also serve a useful didactical purpose.

A neutral particle with spin $1/2$ moves in one dimension along the x -direction through a magnetic field of strength $B > 0$ pointing in the z -direction. We characterize the spatial action of the field by $B(x) = Bw(x)$ where $w(x)$ is a dimensionless cut off function given by

$$w(x) = \begin{cases} 1 & \text{if } |x| \leq L \\ g(\frac{|x|-L}{\ell}) & \text{otherwise} \end{cases}, \quad \ell, L > 0. \quad (3)$$

We assume that $g(x), x \geq 0$, is a twice continuously differentiable function with compact support, $0 \leq g(x) \leq 1$ and $g(0) = 1$. The function $g(x)$ describes the switching on and off of the field in space. Since $dw(x)/dx = O(\ell^{-1})$ for $|x| > L$, ℓ^{-1} is a measure of the size of the field gradient in the transition region.

Let $\sigma_z \chi^\sigma = \sigma \chi^\sigma$, $\sigma = \pm 1$. Then, for this model, the stationary solution $\psi_E^\sigma(x)$ of the Schrödinger equation associated with the hamiltonian (2) (setting now $V(x) = 0$) that describes a particle coming from the left with energy E and spin state χ^σ obeys

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \sigma \mu B w(x) - E \right) \psi_E^\sigma(x) = 0 \quad (4)$$

and behaves asymptotically as

$$\psi_E^\sigma(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R_E^\sigma e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty \\ T_E^\sigma e^{ikx}, & x \rightarrow \infty \end{cases} \quad (5)$$

where $\hbar k = \sqrt{2mE}$, and R_E^σ, T_E^σ are the corresponding reflection and transmission coefficients. These coefficients are given by the following proposition:

Proposition. Assume that $w(x)$ is defined as in (3) and that $E - |\mu|B \geq E_0 > 0$. Then

$$\begin{aligned} R_E^\sigma &= O\left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell}\right) \\ T_E^\sigma &= \exp\left(i \int_{-\infty}^{\infty} dx (k^\sigma(x) - k)\right) + O\left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell}\right) \end{aligned} \quad (6)$$

where we have set $\hbar k^\sigma(x) = \sqrt{2m(E + \sigma\mu Bw(x))}$.

Proof. Define $f_{E,\pm}^\sigma(x) = k^\sigma(x)^{-1/2} \exp(\pm i \int_0^x dy k^\sigma(y))$ and write $\psi_E^\sigma(x)$ in the form (dropping now the indices σ, E)

$$\psi(x) = \alpha_+(x)f_+(x) + \alpha_-(x)f_-(x) \quad (7)$$

Since $w(x)$ has compact support, we have $k(x) = k$ for x large enough and the comparison of (5) and (7) as $x \rightarrow \pm\infty$ leads to

$$\begin{aligned} \alpha_+(-\infty) &= \sqrt{k} \exp\left(i \int_{-\infty}^0 dy (k(y) - k)\right), \\ \alpha_+(\infty) &= \sqrt{k} T \exp\left(-i \int_0^{\infty} dy (k(y) - k)\right), \\ \alpha_-(-\infty) &= \sqrt{k} R \exp\left(-i \int_{-\infty}^0 dy (k(y) - k)\right), \\ \alpha_-(\infty) &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

To determine the functions $\alpha_\pm(x)$, we impose the additional relation

$$\frac{d\psi}{dx}(x) \equiv \psi'(x) = ik(x)(\alpha_+(x)f_+(x) - \alpha_-(x)f_-(x)). \quad (9)$$

One checks that $\psi(x)$ verifies (4) if and only if

$$\alpha'(x) = A(x)\alpha(x) \quad (10)$$

with

$$A(x) = \begin{pmatrix} 0 & A_+(x) \\ A_-(x) & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha(x) = \begin{pmatrix} \alpha_+(x) \\ \alpha_-(x) \end{pmatrix} \quad (11)$$

and

$$A_\pm(x) = \frac{1}{2} \frac{k'(x)}{k(x)} \exp\left(\mp 2i \int_0^x dy k(y)\right). \quad (12)$$

The integral equation corresponding to (10)

$$\alpha(x) = \alpha(0) + \int_0^x dy A(y)\alpha(y) \quad (13)$$

can be solved by iteration, leading to the estimate

$$\|\alpha(\pm\infty) - \alpha(0)\| \leq \|\alpha(0)\| \sup_x \left\| \int_0^x dy A(y) \right\| \exp \left(\int_0^{\pm\infty} dy \|A(y)\| \right) \quad (14)$$

From (12) and the form (3) of the cut off $w(x)$ we find

$$\int_0^x dy A_{\pm}(y) = \begin{cases} 0 & \text{if } |x| \leq L \\ \frac{\mu B}{4E} \int_0^{\frac{|x|-L}{\ell}} dy \frac{g'(y)}{h(y)^2} \exp(\mp 2ik(Lh(0) + \ell \int_0^y dz h(z))) & \text{otherwise} \end{cases} \quad (15)$$

where we have introduced the dimensionless quantity

$$h(x) = \frac{\sqrt{2m(E + \sigma\mu Bg(x))}}{\hbar k} = \sqrt{1 + \sigma \frac{\mu B}{E} g(x)}. \quad (16)$$

Noticing that $h(x) \geq \sqrt{E_0/E} > 0$, we clearly have the bound

$$\int_0^{\pm\infty} dy |A_{\pm}(y)| = \frac{|\mu|B}{4E} \int_0^{\infty} dy \frac{|g'(y)|}{h(y)^2} < \infty \quad (17)$$

which is independent of ℓ . Moreover, an integration by parts on (15), together with the properties of $g(x)$, shows that

$$\sup_x \left| \int_0^x dy A_{\pm}(y) \right| = O \left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell} \right). \quad (18)$$

We conclude from (14),(17) and (18) that

$$\alpha(\pm\infty) = \alpha(0) + O \left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell} \right). \quad (19)$$

Combining (8) with (19) leads to the result of the proposition.

The methods used in the proposition are familiar in the semiclassical treatment of reflection and transmission coefficients [10],[11] (see also proposition 2 in [9]). If $w(x)$ is $n+1$ times differentiable the estimate (6) for the reflection coefficient could be improved to $O((k\ell)^{-n})$. However, the estimate for the transmission coefficient appears to be optimal.

Let $\chi^{\text{in}} = c^+ \chi^+ + c^- \chi^-$, $|c^+|^2 + |c^-|^2 = 1$, be the incoming spin state and $\langle S_{\pm} \rangle^{\text{in}} = \langle \chi^{\text{in}}, S_{\pm} \chi^{\text{in}} \rangle = c^{\pm*} c^{\mp}$. Then, when the incoming energy is E , the transmitted part of this spin state through the magnetic field region is

$$\chi_E^{\text{tr}} = T_E^+ c^+ \chi^+ + T_E^- c^- \chi^-. \quad (20)$$

Hence, according to the proposition, $\langle S_{\pm} \rangle_E^{\text{tr}} = \langle \chi_E^{\text{tr}}, S_{\pm} \chi_E^{\text{tr}} \rangle$ is equal to

$$\langle S_{\pm} \rangle_E^{\text{tr}} = \langle S_{\pm} \rangle^{\text{in}} T_E^{\pm*} T_E^{\mp} = \langle S_{\pm} \rangle^{\text{in}} \left(e^{\pm i\Theta_E(B)} + O \left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell} \right) \right) \quad (21)$$

with

$$\begin{aligned}\Theta_E(B) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (k^-(x) - k^+(x)) \\ &= \omega \frac{2L}{v} \left(\frac{\sqrt{1 + \frac{\mu B}{E}} - \sqrt{1 - \frac{\mu B}{E}}}{\frac{\mu B}{E}} + \frac{\ell}{L} \int_0^{\infty} dx \frac{\sqrt{1 + \frac{\mu B}{E} g(x)} - \sqrt{1 - \frac{\mu B}{E} g(x)}}{\frac{\mu B}{E}} \right) \quad (22)\end{aligned}$$

where $v = \hbar k/m$ is the velocity and $\omega = -2\mu B/\hbar$ is the Larmor frequency. Except for the condition $E > |\mu|B$ (the energy is above the potential barriers), the expression (21) is general: the field is not necessarily weak nor did we specify its form in the transition region.

From now on, we assume that the switching on and off of the field occurs on a much larger scale than the wave length of the particle i.e., $\ell \gg k^{-1}$. This assumption is natural if the field is produced by an apparatus of macroscopic size. Then, according to (6), reflections at the boundaries can be neglected and the spin operator, after transmission, has undergone a pure rotation¹. Can we interpret the spin rotation angle $\Theta_E(B)$ as a Larmor precession? Performing a limited Taylor expansion of $\Theta_E(B)$ with respect to the field strength B gives

$$\Theta_E(B) = \omega \frac{2L}{v} \left(1 + O\left(\frac{\ell}{L}\right) \right) \left(1 + O\left(\frac{|\mu|B}{E}\right)^2 \right). \quad (23)$$

Since $2L/v$ is the time of flight of a free classical particle of velocity v in a field region of extension $2L$, we can interpret $\Theta_E(B)$ as a classical Larmor precession if the conditions

$$k^{-1} \ll \ell \ll L, \quad (24)$$

$$|\mu|B \ll E \quad (25)$$

are fulfilled. The two inequalities (24) insure that the effects of the field boundaries can be neglected and (25) is the weak field condition, making thus assumptions (i) and (ii) precise.

Still assuming (24), is it possible to interpret the spin rotation (21) as a Larmor precession beyond the weak field assumption (25)? For this, it would be natural to ask, according to (1), if $\Theta_E(B)$ can be written in the form $\omega t_E(B)$ where $t_E(B)$ is the quantum mechanical mean sojourn time spent by the incoming particle with energy E and spin state χ^{in} in the field region $[-L, L]$. According to the theory of sojourn times [12] (and

¹ To our knowledge the existing literature has only discussed the abrupt switching on of the field in space i.e., a step function. In this case, the above conclusion is no longer valid.

using the results of the proposition) one finds that $t_E(B)$ is given by

$$\begin{aligned} t_E(B) &= \frac{2L}{v^+}|c^+|^2 + \frac{2L}{v^-}|c^-|^2 + \frac{2L}{v} O\left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell}\right) \\ &= \frac{2L}{v} \left(\frac{|c^+|^2}{\sqrt{1 + \frac{\mu B}{E}}} + \frac{|c^-|^2}{\sqrt{1 - \frac{\mu B}{E}}} + O\left(\frac{|\mu|B}{E} \frac{1}{k\ell}\right) \right) \end{aligned} \quad (26)$$

where $v^\pm = \hbar k^\pm/m$ and $\hbar k^\pm = \sqrt{2m(E \pm \mu B)}$. Clearly, since $|c^+|^2 + |c^-|^2 = 1$, $\omega t_E(B)$ agrees with $\Theta_E(B)$ at first order in B , but not in general (except at first order in B , $\omega t_E(B)$ depends on the spin state χ^{in} , which is not the case for the rotation angle $\Theta_E(B)$). Thus, the concept of sojourn time of the particle in the field region does not enable to give a consistent interpretation of the spin rotation angle (22) as a Larmor precession beyond the weak field regime (25).

Consider however the motion of the transmitted waves for the two spin components $\sigma = \pm 1$ corresponding to an initial packet having some smooth energy dispersion $\varphi(E)$ with support $E - |\mu|B > E_0$

$$\varphi_{\text{tr}}^\sigma(x, t) = \int_{E_0 + |\mu|B}^{\infty} dE T_E^\sigma \varphi(E) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\hbar kx - Et)\right). \quad (27)$$

The stationary phase argument together with the result (6) of the proposition (assuming $\ell \gg k^{-1}$ and the initial packet sharply peaked at about E) show that these wave packets have experienced the time delays [12]

$$\tau_E^\sigma = \frac{d}{dE} \arg T_E^\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{m}{\hbar k^\sigma(x)} - \frac{m}{\hbar k} \right). \quad (28)$$

The expression (28) is nothing but the time delay corresponding to the scattering of a classical particle of energy E by the potential $-\sigma\mu B w(x)$.

According to the present analysis, when we let a spin 1/2 particle go through an homogeneous magnetic field (with weak gradients at its boundaries) classical features do not show up primarily in the spin evolution, but rather in the particle translational motion. Indeed, the scattering effect due to the field on both spin component waves $\varphi_{\text{tr}}^\sigma(x, t)$ is just the classical time delay τ_E^σ . For $\mu < 0$, we have obviously $\tau_E^+ > \tau_E^-$, as a consequence of the fact that the "up" and "down" components of the incoming packet move with different velocities $v^+ > v^-$ in the field region. On the other hand, according to formula (22), the spin rotation angle $\Theta_E(B)$ results of a genuine quantum mechanical interference phenomenon between the two wave components. Then it turns out that in sufficiently weak fields $\Theta_E(B)$ reduces to the usual classical Larmor rotation angle.

This interpretation is in complete accordance with the view expressed in [5] (see also [9]) that the basic effect is the Stern-Gerlach longitudinal splitting of the wave function

(see [13] and references therein) and that Larmor precession results of an interference between these two Stern-Gerlach states. The consideration of the effects of the field boundaries is important: the presence there of the field gradient is necessary to generate the spatial splitting, but gradients must be weak enough to insure full transmission of the particle through the field region.

References

- [1] C. Piron: *Mécanique quantique*, Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, (1990).
- [2] H. Bernstein: *Phys. Rev. Lett.* **18**, 1102 (1967).
- [3] A. O. Barut, M. Božić, Z. Marić, H. Rauch: *Z. Phys. A* **238**, 1 (1987).
- [4] A. O. Barut, M. Božić: *Phys. Lett. A* **149**, 431 (1990).
- [5] F. Mezei: *Physica B* **151**, 74 (1988).
- [6] A. I. Baz': *Sov. J. Nucl. Phys.* **4**, 182 (1967).
- [7] J. P. Falck, E. H. Hauge: *Phys. Rev. B* **38**, 3287 (1988).
- [8] E. H. Hauge, J. A. Støvneng: *Rev. Mod. Phys.* **61**, 917 (1989).
- [9] Ph. A. Martin, M. Sassoli de Bianchi: *J. Phys. A* **25**, 3627 (1992).
- [10] M. Fédoriouk: *Méthodes asymptotiques pour les équations différentielles ordinaires linéaires*, Editions Mir, Moscou, (1987).
- [11] M. V. Berry: *J. Phys. A* **15**, 3693 (1982).
- [12] Ph. A. Martin: *Acta Phys. Austriaca, Suppl.* **23**, 159 (1981).
- [13] S. Nic Chormaic et al: *J. Phys. B* **26**, 1271 (1993).

Deuxième partie

Dans cette deuxième partie nous nous intéressons essentiellement à des systèmes unidimensionnels. Partant de la propriété spectrale du temps de retard, nous dérivons au chapitre VI une version générale du théorème de Levinson. Au chapitre VII, nous utilisons ce dernier pour étudier la variation du nombre d'états liés d'un potentiel périodique fini (superlattice) en fonction de sa période. La méthode nous permettra aussi, pour un potentiel sans états liés, de donner une borne inférieure pour le comportement du temps de retard au seuil de l'énergie zéro. Enfin, au chapitre VIII, nous généralisons la méthode de la phase variable au cas d'une particule dont la masse varie avec la position, et dérivons dans ce cadre la propriété de factorisation de la matrice de diffusion.

VI. De la propriété spectrale du temps de retard au théorème de Levinson

1. Introduction

La logique de ce chapitre est la suivante. Nous partons de la relation de complétude pour les états physiques et montrons qu'elle implique la propriété spectrale du temps de retard. Nous montrons ensuite que cette dernière donne lieu, à son tour, au théorème de Levinson.

1.1. La propriété spectrale du temps de retard

Soit \mathcal{H} l'espace des états d'un système de diffusion. Ce dernier est dit complet si

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \oplus \mathcal{H}_b, \quad (1.1)$$

c'est à dire s'il est la somme directe du sous-espace \mathcal{H}_s des états de diffusion ($s = \text{scattering}$) et du sous-espace \mathcal{H}_b des états liés ($b = \text{bound}$). Plus précisément, cela signifie que les sous-espaces \mathcal{H}_+ des états avec asymptote libre sortante et \mathcal{H}_- avec asymptote libre entrante coïncident i.e.,

$$\mathcal{H}_+ = \mathcal{H}_- = \mathcal{H}_s. \quad (1.2)$$

Les espaces \mathcal{H}_+ et \mathcal{H}_- sont respectivement les images des opérateurs d'ondes Ω_+ et Ω_- qui vérifient, en tant qu'isométries, la relation d'orthonormalité

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} \Omega_{\pm} = I. \quad (1.3)$$

Il suit immédiatement de (1.3) que les $\Omega_{\pm} \Omega_{\pm}^{\dagger}$ sont les projecteurs orthogonaux de \mathcal{H} dans \mathcal{H}_{\pm} . Soit alors P_b le projecteur dans le sous-espace \mathcal{H}_b , engendré par les N états liés $|E_j\rangle$, $j = 1, \dots, N$, du système. Si les $|E_j\rangle$ sont normalisés à 1 i.e., $\langle E_i | E_j \rangle = \delta_{ij}$, nous pouvons écrire, à l'aide de la notation de Dirac,

$$P_b = \sum_{j=1}^N |E_j\rangle \langle E_j|. \quad (1.4)$$

La relation de complétude (1.1) revient alors à écrire

$$\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger} + P_b = I \quad (1.5)$$

et il suit que la trace

$$\begin{aligned} \text{Tr} [\Omega_{\pm}, \Omega_{\pm}^{\dagger}] &= \text{Tr} (\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger} - I) \\ &= -\text{Tr} P_b = -N. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Par la relation (1.6), qui a été originalement dérivée par Jauch [Jau2], nous avons réussi à exprimer le nombre total d'états liés du système entièrement en termes des opérateurs d'ondes. Il est facile de relier le membre de gauche dans (1.6) au temps de retard total. Il suffit pour cela d'exprimer la trace du commutateur $[\Omega_{-}, \Omega_{-}^{\dagger}]$ comme la limite

$$\text{Tr} [\Omega_{-}, \Omega_{-}^{\dagger}] = \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{b_r} d^d x \langle x | [\Omega_{-}, \Omega_{-}^{\dagger}] | x \rangle \quad (1.7)$$

et d'écrire ensuite

$$\begin{aligned} \langle x | [\Omega_{-}, \Omega_{-}^{\dagger}] | x \rangle &= \langle x | \Omega_{-} \Omega_{-}^{\dagger} - I | x \rangle \\ &= \int_0^{\infty} dE \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \left(|\langle x | \Omega_{-} | E, \hat{k} \rangle|^2 - |\langle x | E, \hat{k} \rangle|^2 \right) \end{aligned} \quad (1.8)$$

à l'aide du système complet de pseudo-vecteurs propres $\{|E, \hat{k}\rangle, E \in [0, \infty), \hat{k} \in S^2\}$ de H_0 et $\hat{p} = p/|p|$ (voir la section I.3). En introduisant (1.8) dans (1.7), on obtient pour (1.6)

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dE \text{Tr} \tau_E(b_r) = -2\pi\hbar N \quad (1.9)$$

avec

$$\begin{aligned} \text{Tr} \tau_E(b_r) &= \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \langle \hat{k} | \tau_E(b_r) | \hat{k} \rangle \\ &= \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \left[\langle \hat{k} | T_E(b_r) | \hat{k} \rangle - \langle \hat{k} | T_E^0(b_r) | \hat{k} \rangle \right] \\ &= 2\pi\hbar \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \int_{b_r} d^d x \left(|\langle x | \Omega_{-} | E, \hat{k} \rangle|^2 - |\langle x | E, \hat{k} \rangle|^2 \right) \end{aligned} \quad (1.10)$$

qui est le temps de retard total pour l'énergie E , c'est à dire la trace de l'opérateur $\tau_E(b_r) = T_E(b_r) - T_E^0(b_r)$ de temps de retard local (dans b_r) sur la couche d'énergie E (voir la première partie de cette thèse).

La relation (1.9) exprime la propriété spectrale du temps de retard total. Si le potentiel est à symétrie sphérique $v(x) = v(r)$, $r = |x|$, elle se spécialise à chaque sous-espace de moment angulaire ℓ et m fixé. Il suffit pour cela d'écrire $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3, d^3x)$, pour $d = 3$, comme le produit tensoriel $\mathcal{H} = \mathcal{H}_r \otimes \mathcal{H}_a$ entre la partie radiale $\mathcal{H}_r = L^2([0, \infty], r^2 dr)$ et la partie angulaire $\mathcal{H}_a = L^2(S^2, d\hat{x})$. On introduit ensuite dans \mathcal{H}_a la base $\{|\ell, m\rangle, \ell = 0, 1, \dots; |m| \leq \ell\}$ des vecteurs propres de L^2 et L_z (les harmoniques sphériques) et on remarque que les opérateurs d'ondes sont de la forme

$$\Omega_{\pm} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{|m| \leq \ell} \Omega_{\pm}^{\ell} \otimes |\ell, m\rangle \langle \ell, m| \quad (1.11)$$

en raison du fait que l'hamiltonien H du système commute avec L^2 et L_z . De même, le projecteur dans \mathcal{H}_b est de la forme

$$P_b = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{|m| \leq \ell} P_b^\ell \otimes |\ell, m\rangle\langle \ell, m|, \quad (1.12)$$

avec Ω_\pm^ℓ et P_b^ℓ qui agissent dans le sous espace $\mathcal{H}_{\ell, m}$ de moment angulaire ℓ et m fixé, isomorphe à \mathcal{H}_r^1 . Si on note I_r l'identité dans \mathcal{H}_r , la relation de complétude (1.5) devient

$$\Omega_-^\ell \Omega_-^{\ell \dagger} + P_b^\ell = I_r, \quad (1.13)$$

pour tout $\ell = 0, 1, \dots$. Par la même procédure que ci-dessus, on peut alors récrire (1.13) sous la forme

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_0^\infty dE \tau_E^\ell(b_r) = -2\pi\hbar N^\ell \quad (1.14)$$

avec N^ℓ qui est le nombre d'états liés de moment angulaire ℓ , comptant la multiplicité, et $\tau_E^\ell(b_r)$ le temps de retard dans b_r pour une onde entrante de moment angulaire ℓ et d'énergie E i.e.,

$$\begin{aligned} \tau_E^\ell(b_r) &= 2\pi\hbar \int_0^\infty dr r^2 \int_{S^2} d\hat{x} \left(|\langle x | \Omega_- | E, \ell, m \rangle|^2 - |\langle x | E, \ell, m \rangle|^2 \right) \\ &= \sqrt{\frac{8m}{E}} \int_0^r dr' \left[|u^\ell(E, r')|^2 - |u_0^\ell(E, r')|^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.15)$$

Pour la dernière égalité nous avons utilisé ($\hbar k = \sqrt{2mE}$)

$$\begin{aligned} \langle x | \Omega_- | E, \ell, m \rangle &= i^\ell \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2 k r}} \frac{1}{r} u^\ell(E, r) Y_\ell^m(\hat{x}) \\ \langle x | E, \ell, m \rangle &= i^\ell \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2 k r}} \frac{1}{r} u_0^\ell(E, r) Y_\ell^m(\hat{x}) \end{aligned} \quad (1.16)$$

avec $u^\ell(E, r)$ qui est la solution régulière à l'origine de l'équation de Schrödinger radiale

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \partial_r^2 - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} - V(r) + E \right] u^\ell(E, r) = 0 \quad (1.17)$$

avec comportement asymptotique

$$u^\ell(E, r) = e^{i\delta_E^\ell} \sin \left(kr - \frac{\ell\pi}{2} + \delta_E^\ell \right) + o(1) \quad (1.18)$$

¹ Plus précisément, on dit que $\mathcal{H} = \bigoplus_{\ell, m} \mathcal{H}_{\ell, m}$ est la somme directe des sous-espaces $\mathcal{H}_{\ell, m} = I_r \otimes |\ell, m\rangle\langle \ell, m| \mathcal{H}$, invariants sous le groupe des rotations.

pour $r \rightarrow \infty$. Les phases δ_E^ℓ sont données par les éléments diagonaux

$$\langle \ell, m | S_E | \ell', m' \rangle = e^{2i\delta_E^\ell} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (1.19)$$

de la matrice de diffusion S_E . Dans (1.16) $u_0^\ell(E, r)$ désigne la solution de Riccati-Bessel pour le problème libre et $Y_\ell^m(\hat{x}) = \langle \hat{x} | \ell, m \rangle$.

1.2. Le théorème de Levinson

Le théorème de Levinson, dans sa formulation habituelle, exprime le lien entre le déphasage δ_E^ℓ et le nombre N^ℓ d'états liés de moment angulaire ℓ par la relation

$$\delta_0^\ell - \delta_\infty^\ell = \pi N^\ell. \quad (1.20)$$

Pour le cas $\ell = 0$ il faut en plus distinguer entre les deux alternatives

$$\delta_0^0 - \delta_\infty^0 = \pi N^0 \quad (1.21)$$

et

$$\delta_0^0 - \delta_\infty^0 = \pi \left(N^0 + \frac{1}{2} \right). \quad (1.22)$$

La deuxième est exceptionnelle dans le sens qu'elle correspond à l'existence d'une solution bornée de (1.17) pour $E = 0$. On l'appelle parfois un demi-état lié, à cause du terme additionnel $1/2$, mais elle appartient au spectre continu et sa nature est résonnante.

D'autre part, nous avons vu dans la première partie de cette thèse que le temps de retard local $\tau_E^\ell(b_r)$ est donné, pour $r \rightarrow \infty$, par la formule

$$\tau_E^\ell(b_r) = 2\hbar \partial_E \delta_E^\ell + \hbar A_E^\ell(b_r) + o(1) \quad (1.23)$$

avec

$$A_E^\ell(b_r) = -\frac{1}{2E} \left[\sin(2kr - \ell\pi + 2\delta_E^\ell) - \sin(2kr - \ell\pi) \right] \quad (1.24)$$

qui est la contribution oscillante d'interférence. Si on introduit (1.23) dans (1.14), on obtient immédiatement

$$\delta_0^\ell - \delta_\infty^\ell = \pi N^\ell + \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int_0^\infty dE A_E^\ell(b_r). \quad (1.25)$$

L'égalité (1.25) est très proche du résultat de Levinson (1.20)-(1.22). La seule différence est la présence de la contribution oscillante dans la partie droite de (1.25). Nous montrerons dans l'article qui suit comment l'étude de cette contribution permet de dériver le théorème de Levinson dans toute sa généralité, c'est à dire tout en tenant compte de l'alternative (1.21),(1.22). Pour cela, nous nous limiterons au problème à une dimension spatiale. Si le potentiel est invariant par parité les solutions impaires sont alors équivalentes au problème tridimensionnel pour $\ell = 0$. Nous traiterons aussi le cas d'un potentiel de forme quelconque utilisant au lieu de (1.14) la propriété (1.9) de la trace du temps de retard.

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

M. Sassoli de Bianchi, *Levinson's theorem, zero-energy resonances, and time delay in one-dimensional scattering systems*, J. Math. Phys., **35**, 1994, pp. 2719-2733.

Levinson's theorem, zero-energy resonances and time delay in one-dimensional scattering systems

M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. The one-dimensional Levinson's theorem is derived and used to study zero-energy resonances in a double-potential system. The low energy behavior of time delay is also investigated. In particular, we show that the quantum mechanical time delay admits a classical lower bound, in the low energy limit, if the potential has no bound-state solutions.

1. Introduction

The Levinson's theorem in its usual formulation^{1,2} asserts that for a spherically symmetric potential $V(r)$ producing the phase shift $\delta_\ell(k)$ and n_ℓ bound states of angular momentum ℓ , one has, with the convention $\delta_\ell(\infty) = 0$,

$$\delta_\ell(0) = n_\ell \pi \quad (1.1)$$

for $\ell \geq 1$ and

$$\delta_0(0) = n_0 \pi \quad (1.2)$$

or

$$\delta_0(0) = \left(n_0 + \frac{1}{2} \right) \pi \quad (1.3)$$

for $\ell = 0$, according to whether there is a zero-energy solution (which vanishes at the origin and is finite at infinity) or not. The exceptional case (1.3) occurs when the Jost function of the S -wave vanishes at threshold. One usually speaks of the occurrence of a "half bound-state" (because of the additional term $1/2$ in (1.3)) or of a zero-energy resonance (since the S -wave total scattering cross section approaches infinity at threshold).

A large literature is devoted to the proof of Levinson's theorem (1.1)-(1.3) for central potentials and its generalized versions for scattering by non-spherically symmetric and/or non-local potentials (see ref. 3 and the references cited there). For instance, the exact analog, in the case of noncentral potentials, of the S -wave zero-energy resonance (1.3) has been obtained by Newton⁴ by the method of Fredholm theory (however, for noncentral potentials, "half bound-states" do not appear to be in relation with specific values of the angular momentum).

Although they bring into play a variety of mathematical methods, all these extensions of Levinson's theorem are the consequence of a common simple principle. This principle is the orthogonality and completeness relation for the eigenfunctions of the total Hamiltonian, as was first noticed by Jauch⁵.

The role played by the completeness of states in the derivation of Levinson's theorem was recently emphasized by Poliatzky⁶, showing that the full information on phase shifts contained in the normalization integral for the scattering wave functions, when combined with the completeness relation, allows to derive Levinson's theorem in a simple and general way. In particular, it was pointed out in ref. 6 that besides the well known "half bound states", a second kind of zero-energy solution may occur for the S -wave scattering, with an additional term $1/4$ instead of $1/2$.

Levinson's theorem may also be considered as the consequence of another basic principle. This principle is the spectral property of time delay which states that the total time delay experienced by an incident plane wave of energy E is proportional to the change of state density produced by the interaction (see ref. 3).

However, the intimate relationship between the number of bound-states and the energy integral of time delay (the spectral property) is also an immediate consequence of the completeness and orthogonality relation for the eigenfunctions of the total hamiltonian. This will be emphasized in section 2 where a general version of the one-dimensional Levinson's theorem is derived. By the way, we shall also point out that there is a missing in the derivation in ref. 6 and that "quarter bound-state" solutions are unphysical.

Levinson's theorem is then used in section 3 to study the mechanism of the appearance of zero-energy resonances in a double-potential system, as the distance d between the two potentials is varied. The time delay at zero-energy resonance is evaluated and compared to the $E \neq 0$ resonance case. Finally, in section 4, causality in the zero-energy limit is investigated. It is found that the quantum mechanical time delay obeys to the classical causal bound not only in the high energy limit, when the particle hardly sees the scatterer, but also in the low energy limit, if the potential has no bound-state solutions.

2. The one-dimensional Levinson's theorem

Consider the one-dimensional Schrödinger equation

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(k, x) + (k^2 - 2mV(x)) \psi(k, x) = 0 \quad (2.1)$$

where $x \in \mathbb{R}$ is the space coordinate, $k \geq 0$ the magnitude of the incident momentum and $V(x)$ the potential. For sake of simplicity we shall assume in what follows that $V(x)$ is bounded everywhere and that $V(x) = 0$ for $x \leq x_1$ and $x \geq x_2$. Then, all the formal operations in our discussion below are easily proved to be legitimate (see for instance ref. 7,8).

The physical solutions of (2.1) are the two linearly independent solutions $\psi_{\pm}(k, x)$, uniquely determined by the boundary conditions

$$\psi_+(k, x) = \begin{cases} T(k)e^{ikx} & \text{if } x \geq x_2 \\ e^{ikx} + L(k)e^{-ikx} & \text{if } x \leq x_1 \end{cases} \quad (2.2)$$

and

$$\psi_-(k, x) = \begin{cases} e^{-ikx} + R(k)e^{ikx} & \text{if } x \geq x_2 \\ T(k)e^{-ikx} & \text{if } x \leq x_1 \end{cases} \quad (2.3)$$

where $T(k)$ is the transmission coefficient and, $L(k)$ and $R(k)$, are the reflection coefficients from the left and from the right respectively. The scattering matrix $S(k)$ is a 2×2 unitary matrix defined as

$$S(k) = \begin{pmatrix} T(k) & R(k) \\ L(k) & T(k) \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

which can be shown to be continuous and such that⁷

$$S(k) = I + O\left(\frac{1}{k}\right) \quad (2.5)$$

as $k \rightarrow \infty$. The spectrum of (2.1) is known to be complete⁷. Thus, we have the completeness relationship

$$\sum_{j=1}^N \psi_{E_j}^*(x) \psi_{E_j}(x') + \frac{1}{2\pi} \sum_{\rho=\pm} \int_0^{\infty} dk \psi_{\rho}^*(k, x) \psi_{\rho}(k, x') = \delta(x - x') \quad (2.6)$$

where the $\psi_{E_j}(x)$, $E_j < 0$ are the bound-states eigenfunctions, normalized according to

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_{E_j}(x)|^2 = 1. \quad (2.7)$$

On the other hand, for the free particle ($V(x) = 0$) there are no bound-state solutions and the completeness relation simply reads

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{\rho=\pm} \int_0^{\infty} dk \psi_{\rho}^{0*}(k, x) \psi_{\rho}^0(k, x') = \delta(x - x') \quad (2.8)$$

where $\psi_{\pm}^0(k, x) = e^{\pm ikx}$. Subtracting (2.8) from (2.6), then setting $x = x'$ and integrating from $-R$ to R , one finds

$$\int_0^{\infty} dk \frac{k}{m} \text{Tr } \tau(k, R) = -2\pi \sum_{j=1}^N \int_{-R}^R dx |\psi_{E_j}(x)|^2 \quad (2.9)$$

where

$$\text{Tr } \tau(k, R) = \frac{m}{k} \sum_{\rho=\pm} \int_{-R}^R dx (|\psi_{\rho}(k, x)|^2 - |\psi_{\rho}^0(k, x)|^2) \quad (2.10)$$

is the trace of the (on shell) time delay operator $\tau(k, R)$ for a (here one-dimensional) ball of radius R (see ref. 3). According to (2.7), one then obtains

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\infty dk \frac{k}{m} \text{Tr} \tau(k, R) = -2\pi N. \quad (2.11)$$

It is worth noting that the same reasoning leading to (2.11) can be easily generalized to the case of more than one spatial dimension as long as a completeness relation between scattering states and bound-states holds. Indeed, (2.11) constitutes the most general statement on the link between time delay and bound-states. To derive from (2.11) the one-dimensional Levinson's theorem (i.e., the relationship between scattering phase shifts and bound-states) it is useful to consider the solutions of (2.1) of the form

$$\begin{bmatrix} u_+(k, x) \\ u_-(k, x) \end{bmatrix} = U(k) \begin{bmatrix} \psi_+(k, x) \\ \psi_-(k, x) \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

where

$$U(k) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{R(k)/L(k)} & -1 \\ 1 & \sqrt{L(k)/R(k)} \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{2i\gamma(k)} & -1 \\ 1 & e^{-2i\gamma(k)} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

is the k -dependent unitary transformation which diagonalizes the scattering matrix i.e.,

$$U(k)S(k)U^\dagger(k) = \begin{pmatrix} e^{2i\delta_+(k)} & 0 \\ 0 & e^{2i\delta_-(k)} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

with

$$e^{2i\delta_+(k)} = T(k) - \sqrt{L(k)R(k)}, \quad e^{2i\delta_-(k)} = T(k) + \sqrt{L(k)R(k)} \quad (2.15)$$

or, equivalently

$$T(k) = \frac{1}{2} (e^{2i\delta_-(k)} + e^{2i\delta_+(k)}) = e^{i(\delta_-(k) + \delta_+(k))} \cos(\delta_-(k) - \delta_+(k)) \quad (2.16)$$

and

$$\sqrt{L(k)R(k)} = \frac{1}{2} (e^{2i\delta_-(k)} - e^{2i\delta_+(k)}) = e^{i(\delta_-(k) + \delta_+(k) + \frac{\pi}{2})} \sin(\delta_-(k) - \delta_+(k)). \quad (2.17)$$

According to (2.13), we also have

$$L(k) = e^{i(\delta_-(k) + \delta_+(k) + 2\gamma(k) + \frac{\pi}{2})} \sin(\delta_-(k) - \delta_+(k)) \quad (2.18)$$

and

$$R(k) = e^{i(\delta_-(k) + \delta_+(k) - 2\gamma(k) + \frac{\pi}{2})} \sin(\delta_-(k) - \delta_+(k)). \quad (2.19)$$

From (2.12) and (2.13), one finds that the solutions $u_\pm(k, x)$ satisfy the boundary conditions

$$u_+(k, x) = i\sqrt{2}e^{i(\delta_+(k) + \gamma(k))} \begin{cases} \sin(kx + \gamma(k) + \delta_+(k)) & \text{if } x \geq x_2 \\ \sin(kx + \gamma(k) - \delta_+(k)) & \text{if } x \leq x_1 \end{cases} \quad (2.20)$$

and

$$u_-(k, x) = \sqrt{2}e^{i(\delta_-(k)-\gamma(k))} \begin{cases} \cos(kx + \gamma(k) + \delta_-(k)) & \text{if } x \geq x_2 \\ \cos(kx + \gamma(k) - \delta_-(k)) & \text{if } x \leq x_1. \end{cases} \quad (2.21)$$

Furthermore, $U(k)$ being unitary, they also satisfy the completeness relationship

$$\sum_{j=1}^N \psi_{E_j}^*(x) \psi_{E_j}(x') + \frac{1}{2\pi} \sum_{\rho=\pm} \int_0^\infty dk u_\rho^*(k, x) u_\rho(k, x') = \delta(x - x'). \quad (2.22)$$

2.1. The symmetric case

For a parity invariant potential $V(x) = V(-x)$, $x_2 = -x_1$, we have $R(k) = L(k)$ implying $\gamma(k) = 0$. Then, $u_+(k, x)$ and $u_-(k, x)$ correspond to the usual diagonal representation of the scattering matrix in terms of odd and even functions of the momentum k . In this special case, the completeness relationship between scattering solutions and bound-state solutions holds separately for the odd and even states i.e.,

$$\sum_{j=1}^{n_\pm} \psi_{\pm, E_j}^*(x) \psi_{\pm, E_j}(x') + \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk u_\pm^*(k, x) u_\pm(k, x') = \delta(x - x') \mp \delta(x + x') \quad (2.23)$$

where the $\psi_{\pm, E_j}(x)$ are respectively the odd and even bound-state eigenfunctions and $n_+ + n_- = N$. Subtracting the completeness relation for the free particles solutions $u_\pm^0(k, r)$ (corresponding to $\delta_\pm(k) = 0$) from (2.23), then setting $x = x'$ and integrating from $-R$ to R , one finds

$$\int_0^\infty dk \frac{k}{m} \tau_\pm(k, R) = -2\pi \sum_{j=1}^{n_\pm} \int_{-R}^R dx |\psi_{\pm, E_j}(x)|^2 \quad (2.24)$$

where

$$\tau_\pm(k, R) = \frac{m}{k} \int_{-R}^R dx (|u_\pm(k, x)|^2 - |u_\pm^0(k, x)|^2) \quad (2.25)$$

are respectively the time delays for the interval $[-R, R]$ and for an incoming odd and even wave of energy $E = k^2/2m$ (see ref. 3). By differentiating the Schrödinger equation (2.1) with respect to k , one finds the identity³

$$|u_\pm(k, r)|^2 = \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial u_\pm^*}{\partial x} \frac{\partial u_\pm}{\partial k} - u_\pm^* \frac{\partial^2 u_\pm}{\partial x \partial k} \right) (k, x) \quad (2.26)$$

from which the time delays (2.25) are readily calculated, for large R , using the asymptotic form (2.20),(2.21) (here with $\gamma(k) = 0$) with the result (we use the prime to denote the derivative with respect to k)

$$\begin{aligned} \tau_\pm(k, R) &= 2\frac{m}{k} \delta'_\pm(k) \mp \frac{m}{k^2} [\sin(2kR + 2\delta_\pm(k)) - \sin(2kR)] \\ &= \frac{m}{k} \left(2\delta'_\pm(k) \pm 2\pi \sin^2 \delta_\pm(k) \frac{\sin 2kR}{\pi k} \mp \frac{\sin 2\delta_\pm(k)}{k} \cos 2kR \right). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Inserting (2.27) into (2.24) we obtain, for R sufficiently large,

$$\begin{aligned} \delta_{\pm}(\infty) - \delta_{\pm}(0) \pm \pi \int_0^{\infty} dk \sin^2 \delta_{\pm}(k) \frac{\sin 2kR}{\pi k} \mp \\ \mp \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dk \frac{\sin 2\delta_{\pm}(k)}{k} \cos 2kR = -\pi \sum_{j=1}^{n_{\pm}} \int_{-R}^R dx |\psi_{\pm, E_j}(x)|^2. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Moreover, if we define $\delta_{\pm}(k)$ to be continuous for $0 \leq k < \infty$ and such that (use (2.5))

$$\delta_{\pm}(k) = O\left(\frac{1}{k}\right) \quad (2.29)$$

we find from (2.7) and (2.29) that (2.28) yields, as $R \rightarrow \infty$ (when $k = 0$ we drop it from the notation i.e., $\delta_{\pm} \equiv \delta_{\pm}(0)$),

$$\delta_{\pm} = n_{\pm}\pi \pm \frac{\pi}{2} \sin^2 \delta_{\pm}. \quad (2.30)$$

Furthermore, the right hand side of (2.28) being finite (because of (2.7) and the finiteness of the number of bound-states), the integrals in the left hand side of (2.28) are also finite (since $\delta_{\pm}(\infty) = 0$ and that the continuous functions $\delta_{\pm}(k)$ have a finite limit as $k \rightarrow 0$). Their integrability at infinity follows from (2.29) but the integrability at the origin of the second integral implies

$$\sin 2\delta_{\pm} = 0. \quad (2.31)$$

Clearly, the only solutions for (2.30) and (2.31) are, for the odd states,

$$\delta_+ = n_+\pi, \quad \delta_+ = \left(n_+ + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (2.32)$$

corresponding respectively to the case without and with zero-energy solution (or zero-energy resonance or “half bound-state”). On the other hand, for the even states, one finds

$$\delta_- = \left(n_- - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \delta_- = n_-\pi \quad (2.33)$$

where again the second solution corresponds to the case of a zero-energy resonance.

Notice that the scattering problem for $u_+(k, x)$ is the same as the three-dimensional S -wave scattering problem and yields the same solutions (1.2),(1.3) with n_+ replaced by the total number n_0 of bound-states of zero angular momentum. On the other hand, the even solutions (2.33) differ from the odd ones by an additional term $-1/2$.

In ref. 6 it was pointed out that

$$\delta_{\pm} = \left(n_{\pm} \pm \frac{1}{4}\right)\pi \quad (2.34)$$

are also solutions of (2.30). However, they cannot represent a second kind of physically realizable zero-energy solutions, since they break condition (2.31).

A physical zero-energy solution of the one-dimensional Schrödinger equation (2.1) is a non-zero constant solution outside the range of the potential. Thus, it is not normalizable and it is part of the continuum. However, contrary to the continuous spectrum which is doubly degenerate (the particle can come either from the left or from the right), a zero-energy solution is non-degenerate (as it is the case for the discrete spectrum). Indeed, the Wronskian of two solutions of a one-dimensional Schrödinger equation is a constant which, for linearly independent solutions, differs from zero. But the Wronskian of two zero-energy solutions, which are constant far from the potential, is clearly zero implying that they must be linearly dependent. Thus, we must have $\psi_+(0, x) = \alpha\psi_-(0, x)$, $\alpha \in \mathbb{C}$, which implies, according to (2.2),(2.3) (here with $L(k) = R(k)$ and we have set $L \equiv L(0)$, $T \equiv T(0)$),

$$1 + L = T \quad \text{or} \quad 1 + L = -T \quad (2.35)$$

corresponding respectively to the even and odd solutions. Moreover, from the unitarity of the scattering matrix (2.4), it follows that

$$|T|^2 + |L|^2 = 1, \quad \text{Re} TL^* = 0. \quad (2.36)$$

Equations (2.35) and (2.36) may then be easily solved and one finds that the only solutions are

$$T = 0, \quad L = -1 \quad (2.37)$$

or

$$T = -1, \quad L = 0 \quad (2.38)$$

or

$$T = 1, \quad L = 0. \quad (2.39)$$

According to (2.16),(2.17) we find that (2.37) corresponds to the choice

$$\delta_+ = n_+\pi, \quad \delta_- = \left(n_- - \frac{1}{2}\right)\pi \quad (2.40)$$

without zero-energy resonance. On the other hand, (2.38) and (2.39) correspond respectively to

$$\delta_+ = \left(n_+ + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \delta_- = \left(n_- - \frac{1}{2}\right)\pi \quad (2.41)$$

with an odd zero-energy resonance and to

$$\delta_+ = n_+\pi, \quad \delta_- = n_-\pi \quad (2.42)$$

with an even zero-energy resonance. In other terms, the reflection probability $|R(k)|^2$ is “normally” unity at threshold, when the potential supports no zero-energy solution. On the contrary, when a zero-energy solution exists, one observes a resonance transmission (i.e., a vanishing reflection coefficient) at threshold.

2.2. The non-symmetric case

Consider now the case of a non-symmetric potential $V(x)$. Then, expressing the trace (2.10) in terms of the solutions (2.12) and using again the identity (2.26), we find, for a large R ,

$$\begin{aligned}
\text{Tr } \tau(k, R) &= \frac{m}{k} \sum_{\rho=\pm} \int_{-R}^R dx \left(|u_{\rho}(k, x)|^2 - |u_{\rho}^0(k, x)|^2 \right) \\
&= 2 \frac{m}{k} \left(\delta'_+(k) + \delta'_-(k) \right) - \frac{m}{k^2} \cos 2\gamma(k) [\sin(2kR + 2\delta_+(k)) - \sin(2kR + 2\delta_-(k))] \\
&= \frac{m}{k} \left\{ 2\delta'_+(k) + 2\delta'_-(k) + \cos 2\gamma(k) \left[\left(\pi \sin^2 \delta_+(k) - \pi \sin^2 \delta_-(k) \right) \frac{\sin 2kR}{\pi k} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{2}{k} \sin(\delta_-(k) - \delta_+(k)) \cos(\delta_-(k) + \delta_+(k)) \cos 2kR \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Inserting (2.43) into (2.9), then taking the limit $R \rightarrow \infty$ and using (2.29), we find (with $\gamma \equiv \gamma(0)$)

$$\begin{aligned}
\delta_+ + \delta_- &= \pi N + \frac{\pi}{2} \cos 2\gamma \left(\sin^2 \delta_+ - \sin^2 \delta_- \right) \\
&= \pi N - \frac{\pi}{2} \cos 2\gamma \sin(\delta_- - \delta_+) \sin(\delta_- + \delta_+)
\end{aligned} \tag{2.44}$$

together with the condition (the analogue of (2.31))

$$\cos 2\gamma \sin(\delta_- - \delta_+) \cos(\delta_- + \delta_+) = 0. \tag{2.45}$$

To solve (2.44), (2.45), we start by considering the case $\cos 2\gamma \neq 0$. Then, (2.45) gives $\sin(\delta_- - \delta_+) \cos(\delta_- + \delta_+) = 0$. If $\cos(\delta_- + \delta_+) = 0$, then (2.44) yields $|\cos 2\gamma \sin(\delta_- - \delta_+)| = 1$. For the case $\cos 2\gamma = 1$, the solutions are clearly of the form (with n and m positive integers)

$$\delta_+ = n\pi, \quad \delta_- = \left(m - \frac{1}{2} \right) \pi, \quad n + m = N \tag{2.46}$$

and

$$\delta_+ = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad \delta_- = m\pi, \quad n + m = N. \tag{2.47}$$

On the other hand, for $\cos 2\gamma = -1$, one finds

$$\delta_+ = \left(n - \frac{1}{2} \right) \pi, \quad \delta_- = m\pi, \quad n + m = N \tag{2.48}$$

and

$$\delta_+ = n\pi, \quad \delta_- = \left(m + \frac{1}{2} \right) \pi, \quad n + m = N. \tag{2.49}$$

However, for the solutions (2.47) and (2.49), $u_+(0, x)$ and $u_-(0, x)$ are readily seen to be linearly independent. Thus, they must be discarded (we recall that a physical zero-energy solution is non-degenerate). Moreover, by (2.18) and (2.19) one finds that (2.46)

and (2.48) correspond to $L = R = -1$ i.e., to a reflection probability which is unity at threshold.

If $\cos(\delta_- + \delta_+) \neq 0$, then $\sin(\delta_- - \delta_+) = 0$ and (2.44) gives $\delta_+ + \delta_- = N\pi$. Thus, the solutions are of the form

$$\delta_+ = \left(n \pm \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \delta_- = \left(m \mp \frac{1}{2}\right)\pi, \quad n + m = N \quad (2.50)$$

or

$$\delta_+ = n\pi, \quad \delta_- = m\pi, \quad n + m = N \quad (2.51)$$

yielding respectively (use (2.16)) $T = -1$ and $T = 1$ i.e., a vanishing reflection coefficient at threshold.

Finally, for $\cos 2\gamma = 0$, we also have $\delta_+ + \delta_- = N\pi$ but the difference $\delta_- - \delta_+$ may now in principle take any value and one can only say that a finite portion of the incident particles is transmitted at threshold. Notice however that $T \neq 0$. Indeed, if $T = 0$, then $\psi_{\pm}(0, x) = 0$ for all x , so that we must have $L = R = -1$. But for $\cos 2\gamma = 0$, it follows from (2.18) and (2.19) that $L = -R$, in contradiction to the assertion hereabove.

To summarize, let us reformulate the results hereabove in terms of the phases $\alpha_T(k) = \arg T(k)$, $\alpha_L(k) = \arg L(k)$ and $\alpha_R(k) = \arg R(k)$ of the transmission and reflection coefficients. For this, we observe from (2.16) and (2.17) that, *modulo* π ,

$$\alpha_T(k) = \delta_-(k) + \delta_+(k), \quad \frac{1}{2}(\alpha_L(k) + \alpha_R(k)) = \delta_-(k) + \delta_+(k) + \frac{\pi}{2}. \quad (2.52)$$

Thus, setting

$$\alpha_T(\infty) = 0, \quad \frac{1}{2}(\alpha_L(\infty) + \alpha_R(\infty)) = \frac{\pi}{2} \quad (2.53)$$

we obtain the solutions (dropping the $k = 0$ argument)

$$\alpha_T = \left(N - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \frac{1}{2}(\alpha_L + \alpha_R) = N\pi, \quad L = R = -1 \quad (2.54)$$

and

$$\alpha_T = N\pi, \quad \frac{1}{2}(\alpha_L + \alpha_R) = \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad T \neq 0 \quad (2.55)$$

corresponding respectively to the case without and with zero-energy resonance. For the special case of a symmetric potential we have $L(k) = R(k)$ and, according to (2.37)-(2.42), (2.54),(2.55) are respectively to be replaced by

$$\alpha_T = \left(N - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \alpha_L = N\pi, \quad L = -1 \quad (2.56)$$

and

$$\alpha_T = N\pi, \quad \alpha_L = \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad L = 0. \quad (2.57)$$

A different proof of the one-dimensional Levinson's theorem, with the help of the analytic properties of the Jost functions, was given in ref. 9. Note that the theorem was incorrectly stated in ref. 9 but subsequently corrected in ref. 10, footnote 20; see also ref. 11. A very simple heuristic derivation of the one-dimensional Levinson's theorem was also given in ref. 12 for the special case of a reflectionless potential. However, since for a reflectionless potential $L(k) = 0$ for all k , the authors find the result (2.55) with a zero-energy resonance (or "half bound-state") i.e., they find the "exceptional" case instead of the "generic" one.

3. Zero-energy resonances in a double-potential system

The purpose of the present section is to use the results (2.53)-(2.57) to study the mechanism of the appearance of zero-energy resonances in the one-dimensional scattering by the potential

$$V(x) = v\left(x + \frac{d}{2}\right) + v\left(x - \frac{d}{2}\right) \quad (3.1)$$

where $v(x)$ is a finite range potential with support in the interval $[-a/2, a/2]$ and $d \geq a$. For this, we first observe that, in one dimension, the scattering matrix (2.4) for a potential $V(x)$ can be expressed in a rather simple way in terms of the scattering matrices of the fragments of that potential. To be more precise, we write the potential $V(x)$ as the sum

$$V(x) = V_1(x) + V_2(x) \quad (3.2)$$

where we have defined ($y \in \mathbb{R}$)

$$V_1(x) \equiv V(x)\chi_{(-\infty, y)}(x), \quad V_2(x) \equiv V(x)\chi_{(y, \infty)}(x) \quad (3.3)$$

with $\chi_I(x)$ being the characteristic function of the interval I . Let

$$S_i(k) = \begin{pmatrix} T_i(k) & R_i(k) \\ L_i(k) & T_i(k) \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

be the scattering matrix for the potential $V_i(x)$, $i = 1, 2$. Then, we have the factorization formula¹³

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{T(k)} & -\frac{R(k)}{T(k)} \\ \frac{L(k)}{T(k)} & \frac{1}{T(k)^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T_1(k)} & -\frac{R_1(k)}{T_1(k)} \\ \frac{L_1(k)}{T_1(k)} & \frac{1}{T_1(k)^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{T_2(k)} & -\frac{R_2(k)}{T_2(k)} \\ \frac{L_2(k)}{T_2(k)} & \frac{1}{T_2(k)^*} \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

Clearly, the double-potential (3.1) is the sum of two compactly supported fragments and we may apply the factorization formula (3.5). For this, let

$$s(k) = \begin{pmatrix} t(k) & r(k) \\ l(k) & t(k) \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

be the scattering matrix for the potential $v(x)$. Under the transformation $v(x) \rightarrow v(x \pm d/2)$, it is transformed as

$$s(k) \rightarrow s_{\pm}(k) = \begin{pmatrix} t(k) & e^{\pm ikd} r(k) \\ e^{\mp ikd} l(k) & t(k) \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Thus, with $S_1(k) = s_+(k)$ and $S_2(k) = s_-(k)$, (3.5) yields for the transmission coefficient

$$T(k) = \frac{t^2(k)}{1 - l(k)r(k)e^{2ikd}}. \quad (3.8)$$

For sake of simplicity, let us first consider the case of a parity invariant potential $v(x)$ i.e., $l(k) = r(k)$. Then, setting $\alpha_t(k) = \arg t(k)$ and $\alpha_l(k) = \arg l(k)$, we may also write

$$|T(k)|^2 = \frac{|t(k)|^4}{1 - 2|l(k)|^2 \cos(2\alpha_l(k) + 2kd) + |l(k)|^4} \quad (3.9)$$

and

$$\alpha_T(k) = 2\alpha_t(k) + A(k) \quad (3.10)$$

where we have defined

$$A(k) = \arctan \left(\frac{|l(k)|^2 \sin(2\alpha_l(k) + 2kd)}{1 - |l(k)|^2 \cos(2\alpha_l(k) + 2kd)} \right). \quad (3.11)$$

It immediately follows from (3.9) that for a given $k \neq 0$, the transmission probability $|T(k)|^2 = 1$, if the resonance condition

$$\cos(2\alpha_l(k) + 2kd) = 1 \quad (3.12)$$

is fulfilled. In other terms, for a given potential $v(x)$ and $k \neq 0$, there is always an infinite number of resonance distances

$$\begin{aligned} d_n(k) &= d_0(k) + \frac{n\pi}{k}, \quad n = 1, 2, \dots \\ d_0(k) &= \inf \{ d \mid \cos(2\alpha_l(k) + 2kd) = 1, d \geq a \} \end{aligned} \quad (3.13)$$

for which the transmission probability for the double-potential (3.1) is unity. On the other hand, if $v(x)$ supports no zero-energy solution, we find from (2.56) that

$$\cos(2\alpha_l(k) + 2kd) = 1 - 2(\alpha'_l + d)^2 k^2 + O(k^4). \quad (3.14)$$

Thus, as $k \rightarrow 0$, the resonance condition (3.12) becomes ($h \equiv h(0)$)

$$h + d = 0 \quad (3.15)$$

where we have defined the spatial shift

$$h(k) \equiv \frac{k}{m}\tau(k) \quad (3.16)$$

caused by the time delay

$$\begin{aligned} \tau(k) &= |t(k)|^2\tau_t(k) + |l(k)|^2\tau_l(k) = |t(k)|^2\frac{m}{k}\alpha'_t(k) + |l(k)|^2\frac{m}{k}\alpha'_l(k) \\ &= \frac{m}{k}\alpha'_t(k) = \frac{m}{k}\alpha'_l(k). \end{aligned} \quad (3.17)$$

For the last two equalities in (3.17), we have used $|t(k)|^2 + |l(k)|^2 = 1$ and the fact that, according to (2.52), $\tau_t(k) = \tau_l(k)$ i.e., transmission and reflection time delays are equal for a symmetric potential (transmission and reflection time delays can be determined by a stationary phase argument; for a more general treatment see ref. 14). Thus, contrary to the case with $k \neq 0$, as $k \rightarrow 0$, there is at most one resonance distance $d = -h$. Moreover, since we must have $d \geq a$, such a resonance condition can be realized only if $h \leq -a$, which can be the case or not depending on the particular choice for the potential $v(x)$. More precisely, we have the following

Proposition 1. Let $V(x) = v(x + d/2) + v(x - d/2)$, $d \geq a$, with $v(x)$ a parity invariant potential such that $v(x) = 0$ if $|x| \geq a/2$.

(A) Assume that $v(x)$ has $n \neq 0$ bound-states and there exist $\varepsilon > 0$ such that $h \leq -(d + \varepsilon)$.

Then, $V(x)$ has

(i) $N = 2n$ bound-states for $d > -h$;

(ii) $N = 2n - 1$ bound-states and a "half bound-state" for $d = -h$;

(iii) $N = 2n - 1$ bound-states for $d < -h$.

(B) Assume that $v(x)$ has n bound-states and a "half bound-state". Then, $V(x)$ has $2n$ bound-states and a "half bound-state" for all $d \geq a$.

Proof. Let us apply Levinson's theorem to (3.10),(3.11). For this, we first observe that $\alpha_T(\infty) = \alpha_t(\infty) = 0$ implies $A(\infty) = \arctan(0) = 0$ ($|l(\infty)| = 0$, by (2.5)). Moreover, since $|l(k)| \neq 1$ for all $k \neq 0$, the denominator in (3.11) never vanishes for $k \neq 0$, so that $A(k)$ is continuous for all k .

(A) According to (2.56), if $v(x)$ has n bound-states, then $\alpha_t = (n - 1/2)\pi$ and (3.10) becomes, as $k \rightarrow 0$ ($A \equiv A(0)$),

$$\alpha_T = (2n - 1)\pi + A. \quad (3.18)$$

To determine A , we recall that⁹ $l(-k) = l^*(k)$ i.e., $|l(-k)| = |l(k)|$ and $\alpha_l(-k) = -\alpha_l(k)$. Thus, since (by (2.56)) $\alpha_l = n\pi$ and $|l| = 1$, we have, as $k \rightarrow 0$,

$$\begin{aligned} |l(k)|^2 &= 1 - ck^2 + O(k^4), \quad c > 0 \\ \alpha_l(k) &= n\pi + hk + O(k^3). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Assuming $h + d > 0$, we clearly obtain

$$A = \lim_{k \rightarrow 0} \arctan \left(\frac{2(h+d)k + O(k^3)}{2(h+d)^2 k^2 + ck^2 + O(k^4)} \right) = \frac{\pi}{2} \quad (3.20)$$

and (3.20) into (3.18) yields

$$\alpha_T = \left(2n - \frac{1}{2}\right) \pi \quad (3.21)$$

which proves (i), according to (2.56). In the same way, for $h + d < 0$, we get $A = -\pi/2$, yielding

$$\alpha_T = \left((2n - 1) - \frac{1}{2}\right) \pi \quad (3.22)$$

and establishing (iii). For the case $h + d = 0$, we get from (3.11)

$$A = \lim_{k \rightarrow 0} \arctan \left(\frac{O(k^3)}{ck^2 + O(k^6)} \right) = 0 \quad (3.23)$$

yielding

$$\alpha_T = (2n - 1)\pi \quad (3.24)$$

and proving (ii), according to (2.57). In the same way, using (3.9), it is easy to check that $|T| = 0$ for the case (i) and (iii) and that $|T| = 1$ for the case (ii).

(B) If $v(x)$ has n bound-states and a “half bound-state”, then $|l| = 0$ and (3.10),(3.11) immediately yields

$$\alpha_T = 2n\pi, \quad \forall d \geq a \quad (3.25)$$

which is the desired result according to (2.57).

Condition (i) is always realized for a d sufficiently large, which is consistent with the limiting case of two infinitely separated potentials. As d approaches the critical value $d = -h$, a bound-state level approaches the onset of the continuum and give rise to a vanishing reflection coefficient at threshold. Then, the zero-energy “bound-state” becomes unbound when $d < -h$.

Finally, let us investigate the behavior of the time delay

$$\tau^V(k) = \frac{m}{k} \alpha'_T(k) = \frac{m}{k} \alpha'_L(k) \quad (3.26)$$

for the double-potential $V(x)$. Writing (3.8) in the form (here with $l(k) = r(k)$)

$$T(k) = t(k)^2 + t(k)^2 l(k)^2 e^{2ikd} + t(k)^2 l(k)^4 e^{4ikd} + \dots \quad (3.27)$$

we observe that the transmitted wave represents a sum of waves passing through the two potentials once, or after any number $2n$, $n = 1, 2, \dots$ of internal reflections. Thus, according to (3.10),(3.17), we find that

$$\tau^V(k) = 2\tau(k) + \tau^{\text{int}}(k) \quad (3.28)$$

is the sum of the time delay for the passage through the two potentials once, plus the time delay caused by the internal back and forth of the particle in between the two potentials

$$\tau^{\text{int}}(k) = \frac{m}{k} A'(k). \quad (3.29)$$

When the resonance condition (3.12) is met one finds, after a straightforward calculation,

$$\tau^V(k) = 2\tau(k) + \frac{2|l(k)|^2}{1 - |l(k)|^2} \left(\tau(k) + \frac{m}{k} d \right) \quad (3.30)$$

and for the spatial shift $H(k) \equiv \tau^V(k)k/m$, we have

$$H(k) = 2h(k) + \frac{2|l(k)|^2}{1 - |l(k)|^2} (h(k) + d). \quad (3.31)$$

As $|l(k)| \rightarrow 1$ (with k fixed), the multiple reflection mechanism is enhanced and it follows from (3.30) (or (3.31)) that the time delay (or the spatial shift) approaches in general plus infinity (provided that the resonance distance d is chosen sufficiently large). This is in agreement with the intuitive picture of a long lived metastable state associated with a resonance.

In the low energy limit the situation is however rather different. Indeed, the zero-energy resonance condition (3.15) has the following simple meaning: as $k \rightarrow 0$, the time delay $\tau(k)$ caused by the potential $v(x)$ approaches the value $-dm/k$, which is nothing but minus the time taken by the particle to go from one potential to the other. Thus, everything happens as if the internal back and forth of the particle takes no time in this limit. As a consequence, even though $|l(k)| \rightarrow 1$ as $k \rightarrow 0$, one finds a spatial shift $H \equiv H(0)$ at threshold which remains finite at resonance. Indeed, expanding (3.29) in powers of k , one obtains for $h + d = 0$

$$H = -2d + \frac{1}{3c} \frac{\partial^3 \alpha_l}{\partial k^3}(0). \quad (3.32)$$

Notice however that if $h + d \neq 0$, one finds

$$H = 2h - \frac{2(h+d)^2 + c}{2(h+d)} \quad (3.33)$$

and the spatial shift H approaches plus (minus) infinity when the resonance condition is approached from negative (positive) values of $h + d$. The results of this section may be considered as a generalization of ref. 15, where the special case of the double delta-function potential was considered.

The analysis hereabove of the double-potential system is readily generalized to the case of a non-symmetric potential $v(x)$. In that case, one can easily check that proposition 1 still holds if the (global) time delay $\tau(k)$ is replaced by the averaged (total) time delay

$$\frac{1}{2} \text{Tr} \tau(k) = \frac{m}{k} \alpha'_t(k) = \frac{1}{2} \frac{m}{k} (\alpha'_l(k) + \alpha'_r(k)). \quad (3.34)$$

5. Classical causality at zero-energy

Classical causality says that the particle cannot leave the interaction region before entering it. For a finite range potential $v(x)$, with support in the interval $[-a/2, a/2]$, it means that the classical sojourn time $T_{\text{cl}}(k, a/2)$ in $[-a/2, a/2]$ must be non-negative. Thus, causality implies that the classical time delay

$$\tau_{\text{cl}}(k) = T_{\text{cl}}(k, a/2) - T_{\text{cl}}^{v=0}(k, a/2) \geq -T_{\text{cl}}^{v=0}(k, a/2) = -a \frac{m}{k}. \quad (5.1)$$

For the spatial shift $h_{\text{cl}}(k) = \tau_{\text{cl}}(k)k/m$, we thus find

$$h_{\text{cl}}(k) \geq -a, \quad \forall k. \quad (5.2)$$

The corresponding quantum mechanical causality principle is simply the fact that the quantum sojourn time $T(k, a/2)$ is non-negative³. If $v(x)$ is assumed to be parity invariant, we find for the odd and even scattering states

$$\begin{aligned} T_{\pm}(k, a/2) &= \frac{m}{k} \int_{-a/2}^{a/2} dx |u_{\pm}(k, x)|^2 \\ &= a \frac{m}{k} + 2 \frac{m}{k} \delta'_{\pm}(k) \mp \frac{m}{k^2} \sin(ka + 2\delta_{\pm}(k)) \geq 0 \end{aligned} \quad (5.3)$$

and therefore

$$\delta'_{\pm}(k) \geq -\frac{a}{2} \pm \frac{1}{2k} \sin(ka + 2\delta_{\pm}(k)). \quad (5.4)$$

For the quantum spatial shift $h(k)$, we thus find

$$\begin{aligned} h(k) &= \frac{k}{m} \tau(k) = \delta'_{+}(k) + \delta'_{-}(k) \\ &\geq -a + \frac{1}{2k} [\sin(ka + 2\delta_{+}(k)) - \sin(ka + 2\delta_{-}(k))] \\ &\geq -a - \frac{1}{k}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Because of the presence of the additional interference terms, (5.5) differs in general appreciably from (5.2). However, in the high energy limit $k \rightarrow \infty$, (5.5) clearly agrees with the classical bound (5.2). A similar result holds in the low energy limit $k \rightarrow 0$, when the potential $v(x)$ has no bound-state solutions. More precisely, we have the following

Proposition 2. *Let $v(x)$ be a parity invariant potential, with no bound-state solutions and such that $v(x) = 0$ if $|x| \geq a/2$. Then,*

$$h = \lim_{k \rightarrow 0} h(k) \geq -a. \quad (5.6)$$

Proof. Assume, to the contrary, that $h < -a$. Then, according to proposition 1, it is always possible to find a distance $a \leq d < -h$ for which the double-potential (3.1) gives

$\alpha_T = ((2n - 1) - 1/2)\pi$, with n being the number of bound-states of $v(x)$. If $n = 0$, we find $\alpha_T = -3\pi/2$, in contradiction with Levinson's theorem (2.56)-(2.57).

The same result clearly holds for a non-symmetric potential $v(x)$ if $\tau(k)$ is replaced by $\text{Tr } \tau(k)/2$.

To conclude, let us illustrate the content of proposition 2 in the simple case $v(x) = \lambda\delta(x)$. The transmission coefficient is

$$t(k) = \frac{ik}{ik - m\lambda} \quad (5.7)$$

and

$$\alpha_t(k) = -\arctan\left(\frac{m\lambda}{k}\right). \quad (5.8)$$

If we define $\arctan(0) = 0$, we find $\alpha_t(\infty) = 0$ and

$$\alpha_t(0) = \begin{cases} (0 - 1/2)\pi & \text{if } \lambda > 0 \\ (1 - 1/2)\pi & \text{if } \lambda < 0. \end{cases} \quad (5.9)$$

Thus, according to (2.56), for $\lambda > 0$ the potential has no bound-states and one bound-state for $\lambda < 0$. The spatial shift is

$$h(k) = \frac{m\lambda}{(m\lambda)^2 + k^2} \quad (5.10)$$

and yields, in the low energy limit,

$$h = \lim_{k \rightarrow 0} h(k) = \frac{\lambda}{|\lambda|} \frac{1}{m|\lambda|}. \quad (5.11)$$

For $\lambda > 0$ (no bound-states), we find

$$h = \frac{1}{m|\lambda|} > 0 \quad (5.12)$$

in agreement with proposition 2 (for a delta-function potential $a = 0$). On the other hand, for $\lambda < 0$, the spatial shift at threshold is

$$h = -\frac{1}{m|\lambda|} < 0 \quad (5.13)$$

and thus disagrees with the classical bound (5.2).

Acknowledgments

It is a pleasure to acknowledge Ph. A. Martin for many stimulating and informative discussions.

References

- [1] N. Levinson: Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat. Fys. Medd. **25**, 9 (1949).
- [2] R. G. Newton: J. Math. Phys. **1**, 319 (1960).
- [3] Ph. A. Martin: Acta Phys. Austriaca, Suppl. **23**, 159 (1981).
- [4] R. G. Newton: J. Math. Phys. **18**, 1348 (1977).
- [5] J. M. Jauch: Helv. Phys. Acta **30**, 143 (1957).
- [6] N. Poliatzky: Helv. Phys. Acta **66**, 241 (1993).
- [7] L. D. Faddeev: Am. Math. Soc. Transl. **2**, 139 (1964).
- [8] P. Deift, E. Trubowitz: Commun. Pure Appl. Math. **32**, 121 (1979).
- [9] R. G. Newton: J. Math. Phys. **21**, 493 (1980).
- [10] R. G. Newton: J. Math. Phys. **24**, 2152 (1983).
- [11] R. G. Newton: J. Math. Phys. **25**, 2991 (1984).
- [12] R. Jackiw, G. Woo: Phys. Rev. D **12**, 1643 (1975).
- [13] T. Aktosun: J. Math. Phys. **33**, 3865 (1992).
- [14] M. Sassoli de Bianchi: Helv. Phys. Acta **66**, 361 (1993).
- [15] W. van Dijk, K. A. Kiers: Am. J. Phys. **60**, 520 (1991).

VII. Quel est le nombre d'états liés d'un potentiel périodique fini?

1. Introduction

Dans ce chapitre nous donnons une réponse simple et générale à la question posée dans le titre.

Considérons d'abord le problème de diffusion pour un potentiel $v(x)$, $x \in \mathbb{R}$, de forme générale et à support dans l'intervalle $[-a/2, a/2]$. Notons par T_E son amplitude de transmission et par $\alpha_E^T = \arg T_E$ la phase correspondante. Rappelons que pour le comportement de la probabilité de transmission à énergie zéro, il faut distinguer entre les deux alternatives (voir chapitre VI)

$$|T_E|^2 = c \frac{2m}{\hbar^2} E + O(E^2), \quad c > 0 \quad (1.1)$$

et

$$|T_0|^2 \neq 0. \quad (1.2)$$

Le cas (1.1) est générique et correspond à une probabilité de réflexion qui vaut 1 au seuil de l'énergie zéro. Dans le cas (1.2), une portion des particules incidentes est transmise quand $E \rightarrow 0$. Une telle situation est exceptionnelle et correspond à l'existence d'une solution bornée de l'équation de Schrödinger pour l'énergie zéro (demi-état lié).

En partant de $v(x)$, nous construisons un potentiel périodique fini

$$v_N(x, d) = \sum_{i=0}^{N-1} v(x - id), \quad d \geq a, \quad (1.3)$$

qui forme un réseau de N potentiels identiques, qui ne se superposent pas, et qui sont tous séparés par une même distance d (voir la figure 1). Il est alors naturel de se poser la question suivante.

Question

Donnés le potentiel $v(x)$ et son nombre n d'états liés, la période d et le nombre de répétitions N , quel est le nombre d'états liés de $v_N(x, d)$?

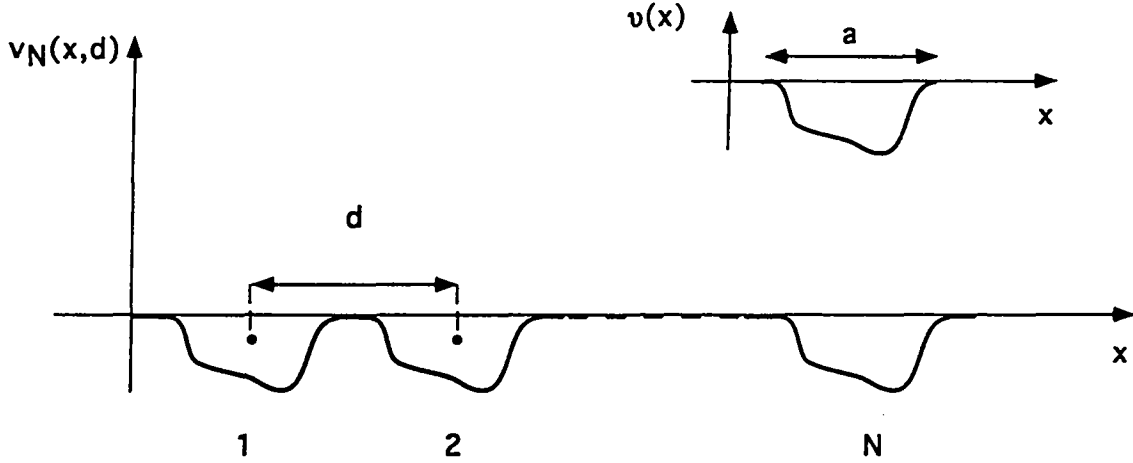


Fig. 1. Potentiel périodique fini de période $d \geq a$.

Réponse

Considérons d'abord le cas générique (1.1). Nous définissons les quantités suivantes. Le retard spatial à énergie zéro

$$h \equiv \lim_{E \rightarrow 0} \frac{\hbar k}{m} \tau_E, \quad (1.4)$$

associé au temps de retard $\tau_E = \hbar \partial_E \alpha_E^T$. Les $N - 1$ distances $d_{N-1} < d_{N-2} < \dots < d_1$, données par

$$d_j = -h + \sqrt{c} \cos(j\pi/N), \quad j = 1, \dots, N - 1, \quad (1.5)$$

avec c qui est la constante positive définie sous (1.1). Nous avons alors la situation suivante. Pour $d > d_1$, $v_N(x, d)$ possède exactement Nn états liés, en accord avec le cas limite de N potentiels infiniment séparés. Quand d approche la première distance d_1 (en supposant $d_1 > a$), un état lié approche le seuil du continu et donne lieu, à $d = d_1$, à une transmission totale à énergie zéro. L'état lié se transforme ensuite en résonance pour $d < d_1$. De manière analogue, à chaque fois que d traverse une distance de résonance d_j (en supposant $d_j > a$), $v_N(x, d)$ perd un état lié. Il possède donc exactement $Nn - j$ états liés pour $d_{j+1} < d < d_j$, $j = 1, \dots, N - 2$, et $Nn - (N - 1)$ états liés pour $a \leq d < d_{N-1}$.

Dans le cas exceptionnel (1.2), la situation est très différente: $v_N(x, d)$ possède Nn états liés plus un demi-état lié pour tout $d \geq a$ i.e., le nombre d'états liés de $v_N(x, d)$ reste constant quand la période d varie.

En d'autres termes, en général, un réseau périodique fini de N potentiels de forme quelconque peut perdre au plus $N - 1$ états liés en réduisant sa période d . Au plus, car toutes les distance d_j ne vérifient pas obligatoirement la condition de non-superposition $d_j > a$.

Dans l'article qui suit nous démontrons ce résultat à l'aide du théorème de Levinson et de la propriété de factorisation de la matrice de diffusion (voir aussi, pour cette dernière, le chapitre VIII). Ce faisant, nous pourrons aussi dériver une borne inférieure pour le temps de retard à énergie zéro, dans le cas particulier d'un potentiel sans états liés.

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura, *On the number of states bound by one-dimensional finite periodic potentials*, J. Math. Phys., **36**, 1995, pp. 1753-1764.

On the number of states bound by one-dimensional finite periodic potentials

M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
CH-1015 Lausanne, Switzerland

M. Di Ventura

Institut de Physique Appliquée, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne
CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. Bound-states and zero-energy resonances of one-dimensional finite periodic potentials are investigated, by means of Levinson's theorem. For finite range potentials supporting no bound states, a lower bound for the (reduced) time delay at threshold is derived.

1. Introduction

In this paper we consider the one-dimensional potential function

$$V_N(x) = \sum_{i=0}^{N-1} v(x - id) \quad (1.1)$$

forming a finite periodic chain of N non-overlapping potentials of general shape. The single potential $v(x)$ has its support in the interval $[-a/2, a/2]$ and $d \geq a$ (non-overlapping condition). The system is of practical interest, for instance for the physics of superlattice electronic devices¹ and optical properties of multiquantum wells². As the number N increases, it also constitutes a simple model exhibiting a solid-statelike behavior i.e., energy bands and gaps^{3,4}. Recently, a complete analytical solution of the scattering problem for $V_N(x)$ has been presented^{3,4}, yielding closed compact expressions for the transmission and reflection coefficients in terms of those for the single potential $v(x)$.

The present work completes the analysis of this system by providing a general description of the bound state structure of $V_N(x)$, in terms of certain quantities characterizing the single scatterer. More precisely, using Levinson's theorem and the factorization property of the scattering matrix, we generalize the analysis of Ref. 5, for the double-potential system, and show that $V_N(x)$ admits at most $N - 1$ resonance distances $d_j, j = 1, \dots, N - 1$, for which the reflection coefficient vanishes at threshold and which correspond to a bound state level turning into a resonance. As a consequence, we find that, by lowering the spacing d between the potentials, $V_N(x)$ can lose at most $N - 1$ bound state solutions.

For a potential supporting no bound states, the method also allows us to derive a lower bound for the (reduced) time delay at threshold which improves one recently obtained in Ref. 5.

The work is organized as follows. In Section 2 we review some basic facts of the one-dimensional scattering. In Section 3 we discuss the two-potential system, as a preparative for Section 4, where we state and prove our main result on the finite periodic potential. Finally, in Section 5, the lower bound for the zero-energy time-delay, in absence of bound states, is derived.

2. Preliminaries

In this section we present some well-known results of the one-dimensional scattering problem, to establish notation and some needed facts.

The S-matrix. Let $V(x)$, $x \in \mathbb{R}$, be a finite range potential that we shall assume bounded everywhere. The associated scattering matrix is the 2×2 unitary matrix

$$S(k) = \begin{pmatrix} T(k) & R(k) \\ L(k) & T(k) \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

where $T(k) = |T(k)|e^{i\alpha_T(k)}$, $R(k) = |R(k)|e^{i\alpha_R(k)}$ and $L(k) = |L(k)|e^{i\alpha_L(k)}$, are the transmission and reflection coefficients, from the right and left, respectively, at energy $E = k^2/2m$ (m is the mass of the particle and we have set $\hbar = 1$). In addition of being unitary, $S(k)$ has also the property^{6,7}

$$S(-k) = S^*(k). \quad (2.2)$$

For our choice of potential, it is a smooth function of $k \geq 0$, behaving like^{6,7}

$$S(k) = I + O(1/k), \quad (2.3)$$

as $k \rightarrow \infty$. On the other hand, for the low energy limit, the following dichotomy is known to hold^{5,6,7}

$$|T(k)|^2 = Ck^2 + O(k^4), \quad C > 0, \quad (2.4)$$

for the generic case, and

$$|T(k)|^2 = C' + O(k^2), \quad 0 < C' \leq 1, \quad (2.5)$$

for the exceptional case where the potential supports a zero-energy solution. Notice that $C' = 1$ if $v(x)$ is parity invariant^{5,8}. In the following, we shall speak of a zero-energy resonance whenever $|T(0)| = 1$.

Levinson's theorem. Levinson's theorem establishes the relationship between the low energy behavior of the phase $\alpha_T(k) = \arg T(k)$ and the total number M of bound states of

$V(x)$ (see Ref. 5 and references therein). If $\alpha_T(k)$ is defined to be continuous and such that $\alpha_T(\infty) = 0$, then one has [when $k = 0$ we drop it from the notation i.e., $\alpha_T \equiv \alpha_T(0)$, $T \equiv T(0)$, and so on]

$$\alpha_T = \left(M - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad L = R = -1 \quad (2.6)$$

for the generic case, and

$$\alpha_T = M\pi, \quad T \neq 0 \quad (2.7)$$

for the exceptional case with a zero-energy solution. A zero-energy solution is usually called “half bound state” because of the additional term $1/2$ in Eq. (2.7).

Factorization formula. Write the potential $V(x)$ as the sum $V(x) = V_1(x) + V_2(x)$, where we have defined ($y \in \mathbb{R}$)

$$V_1(x) \equiv V(x)\chi_{(-\infty, y)}(x), \quad V_2(x) \equiv V(x)\chi_{(y, \infty)}(x), \quad (2.8)$$

with $\chi_I(x)$ being the characteristic function of the interval I . Let

$$S_i(k) = \begin{pmatrix} T_i(k) & R_i(k) \\ L_i(k) & T_i(k) \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

be the scattering matrix for the potential $V_i(x)$, $i = 1, 2$. Then, we have the factorization formula⁹

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{T(k)} & -\frac{R(k)}{T(k)} \\ \frac{L(k)}{T(k)} & \frac{1}{T(k)^*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{T_1(k)} & -\frac{R_1(k)}{T_1(k)} \\ \frac{L_1(k)}{T_1(k)} & \frac{1}{T_1(k)^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{T_2(k)} & -\frac{R_2(k)}{T_2(k)} \\ \frac{L_2(k)}{T_2(k)} & \frac{1}{T_2(k)^*} \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

Time delay. Since $S(k)$ is unitary, it can be written $S(k) = e^{i\Delta(k)}$, where $\Delta(k) = -i \log S(k)$ is called the phase shift operator. Taking one half of the trace of $\Delta(k)$ and differentiating with respect to energy ($d/dE = \frac{m}{k}d/dk$) yields the averaged (total) time delay¹⁰

$$\begin{aligned} \tau(k) &= \frac{1}{2} \frac{m}{k} \text{Tr} \Delta'(k) = \frac{1}{2} \frac{m}{k} \text{Tr} (-iS^\dagger(k)S'(k)) \\ &= \frac{m}{k} \alpha'_T(k) = \frac{1}{2} \frac{m}{k} (\alpha'_R(k) + \alpha'_L(k)), \end{aligned} \quad (2.11)$$

where the prime denotes the derivative with respect to k . Notice that $\alpha'_T(k) = \alpha'_R(k) = \alpha'_L(k)$ for a parity invariant potential⁵. In the same way, we also define the spatial shift, $H(k)$, caused by the time delay $\tau(k)$, by

$$H(k) = \frac{k}{m} \tau(k) = \alpha'_T(k) = \frac{1}{2} (\alpha'_R(k) + \alpha'_L(k)). \quad (2.12)$$

3. The two-potential system

Consider the potential

$$V(x) = v_1(x) + v_2(x - d) \quad (3.1)$$

where $v_1(x)$ and $v_2(x)$ have their supports in the intervals $[-a_1/2, a_1/2]$ and $[-a_2/2, a_2/2]$, respectively, and $d \geq (a_1 + a_2)/2$. Let

$$s_i(k) = \begin{pmatrix} t_i(k) & r_i(k) \\ l_i(k) & t_i(k) \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

be the scattering matrix for the potential $v_i(x)$, $i = 1, 2$. When the coordinate axis is shifted by $-d$, the scattering matrix $s_2(k)$ is transformed as $l_2(k) \rightarrow l_2(k)e^{i2kd}$, $r_2(k) \rightarrow r_2(k)e^{-i2kd}$, $t_2(k) \rightarrow t_2(k)$. Therefore, according to the factorization formula (2.10), we find for the transmission coefficient

$$T(k) = \frac{t_1(k)t_2(k)}{1 - r_1(k)l_2(k)e^{2ikd}}. \quad (3.3)$$

For sake of simplicity, we assume in the following that $v_1(x)$ and $v_2(x)$ are parity invariant, i.e., $l_i(k) = r_i(k)$, $i = 1, 2$. Then, we may also write

$$|T(k)|^2 = \frac{|t_1(k)t_2(k)|^2}{1 - 2|l_1(k)l_2(k)| \cos(\alpha_{l_1}(k) + \alpha_{l_2}(k) + 2kd) + |l_1(k)l_2(k)|^2} \quad (3.4)$$

and

$$\alpha_T(k) = \alpha_{t_1}(k) + \alpha_{t_2}(k) + A(k), \quad (3.5)$$

where we have defined

$$A(k) = \arctan \left(\frac{|l_1(k)l_2(k)| \sin(\alpha_{l_1}(k) + \alpha_{l_2}(k) + 2kd)}{1 - |l_1(k)l_2(k)| \cos(\alpha_{l_1}(k) + \alpha_{l_2}(k) + 2kd)} \right). \quad (3.6)$$

Denoting by $h_i = \lim_{k \rightarrow 0} \alpha'_{l_i}(k)$, $i = 1, 2$, the zero-energy limit of the spatial shifts for $v_1(x)$ and $v_2(x)$, respectively, we have the following

Proposition 1.

- (A) Assume that $v_1(x)$ and $v_2(x)$ have n_1 and n_2 bound states, respectively. If one can find a distance $d \geq (a_1 + a_2)/2$, such that
- (i) $h_1 + h_2 + 2d > 0$, then $V(x)$ has $n_1 + n_2$ bound states;
 - (ii) $h_1 + h_2 + 2d = 0$, then $V(x)$ has $n_1 + n_2 - 1$ bound states and a “half bound state”;
 - (iii) $h_1 + h_2 + 2d < 0$, then $V(x)$ has $n_1 + n_2 - 1$ bound states.
- (B) If $v_1(x)$ (or $v_2(x)$) has in addition a “half bound state”, then $V(x)$ has $n_1 + n_2$ bound states for all $d \geq (a_1 + a_2)/2$.

(C) If $v_1(x)$ and $v_2(x)$ have both in addition a “half bound state”, then $V(x)$ has $n_1 + n_2$ bound states and a “half bound state” for all $d \geq (a_1 + a_2)/2$.

Proof. The proof follows essentially the one given in Ref. 5, for the special case of two identical potentials. We apply Levinson’s theorem to Eqs. (3.5),(3.6). We define $\alpha_T(\infty) = \alpha_{t_1}(\infty) = \alpha_{t_2}(\infty) = 0$, implying $A(\infty) = \arctan(0) = 0$ ($l_i(\infty) = 0$, $i = 1, 2$, by Eq. (2.3)). Since $|l_1(k)l_2(k)| \neq 1$, for all $k \neq 0$, the denominator in Eq. (3.6) never vanishes for $k \neq 0$, so that $A(k)$ is a continuous function of k .

(A) According to Eqs. (2.4),(2.6), we have

$$|l_i(k)|^2 = 1 - |t_i(k)|^2 = 1 - c_i k^2 + O(k^4), \quad c_i > 0, \quad i = 1, 2 \quad (3.7)$$

and (dropping the $k = 0$ argument)

$$\alpha_{t_i} = (n_i - 1/2)\pi, \quad i = 1, 2. \quad (3.8)$$

Using Eq. (3.7), the fact that the $\alpha_{l_i}(k)$ are odd functions of k (by Eq. (2.2)), and that $l_1(k)l_2(k) \rightarrow 1$ as $k \rightarrow 0$, implying $\alpha_{l_1} + \alpha_{l_2} = 0 \pmod{\pi}$, we find

$$A = \lim_{k \rightarrow 0} A(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \arctan \left(\frac{2(h_1 + h_2 + 2d)k + O(k^3)}{(h_1 + h_2 + 2d)^2 k^2 + (c_1 + c_2)k^2 + O(k^4)} \right). \quad (3.9)$$

Thus, $A = \pi/2, 0, -\pi/2$ if $h_1 + h_2 + 2d$ is positive, zero and negative, respectively. Introducing Eqs. (3.8) and (3.9) into Eq. (3.5), we obtain the desired result, according to Levinson’s theorem (2.6),(2.7).

(B) If, say, $v_2(x)$ has a “half bound state”, but not $v_1(x)$, then $\alpha_{t_2} = n_2\pi$ and $\alpha_{t_1} = (n_1 - 1/2)\pi$. Furthermore, according to Eq. (3.6), $l_2 = 0$ implies $A = 0$ for all $d \geq (a_1 + a_2)/2$, and Eq. (3.5) yields $\alpha_T = (n_1 + n_2 - \frac{1}{2})\pi$ for all $d \geq (a_1 + a_2)/2$. we conclude by Eq. (2.6).

(C) We have $\alpha_{t_i} = n_i\pi$, $i = 1, 2$ and, seemingly to point (B), $A = 0$ for all $d \geq (a_1 + a_2)/2$, implying $\alpha_T = (n_1 + n_2)\pi$ for all $d \geq (a_1 + a_2)/2$. We conclude by Eq. (2.7).

The Proposition is readily generalized to the case where $v_1(x)$ and $v_2(x)$ are nonsymmetric. In that case, one can easily check that $h_1 + h_2$ is to be replaced by $\alpha'_{r_1} + \alpha'_{l_2}$. For point (B), the only modification is that, as $k \rightarrow 0$, $l_2(k) \rightarrow l_2 \in \mathbb{R}$ (see the appendix of Ref. 8) instead of $l_2(k) \rightarrow 0$. Then, $\alpha_{r_1} + \alpha_{l_2} = 0 \pmod{\pi}$, and now $A = 0$ because of the vanishing of the sine [the same remark holds for point (C)].

In the non resonant case $h_1 + h_2 + 2d \neq 0$, the transmission probability $|T(k)|^2$ has the form (2.4). A straightforward calculation from Eq. (3.4) yields, for the constant C ,

$$C = \frac{c_1 c_2}{(h_1 + h_2 + 2d)^2}. \quad (3.10)$$

From Eqs. (3.5),(3.6), we also find for the spatial shift at threshold,

$$H = h_1 + h_2 - \frac{1}{2} \frac{(h_1 + h_2 + 2d)^2 + c_1 + c_2}{h_1 + h_2 + 2d}. \quad (3.11)$$

In the special case $v_1(x) = v_2(x) = v(x)$ [i.e., $V(x) = V_2(x)$ with the notation of Eq. (1.1)], we recover Proposition 1 of Ref. 5. The resonant condition (ii) becomes $h + d = 0$, where $h = h_1 = h_2$, and corresponds to a transmission probability which is unity at threshold (zero-energy resonance).

4. The finite periodic potential system

Let

$$V_N(x) = \sum_{i=0}^{N-1} v(x - id) \quad (4.1)$$

be a finite periodic chain of N non-overlapping potentials. The single potential $v(x)$ has its support in the interval $[-a/2, a/2]$ and $d \geq a$. We denote by

$$S_N(k) = \begin{pmatrix} T_N(k) & R_N(k) \\ L_N(k) & T_N(k) \end{pmatrix}, \quad s(k) = \begin{pmatrix} t(k) & r(k) \\ l(k) & t(k) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

the scattering matrices for $V_N(x)$ and $v(x)$, respectively. Using the factorization formula (2.10) and the Cayley-Hamilton theorem, one can write the transmission probability $|T_N(k)|^2$ in the compact form^{3,4}

$$|T_N(k)|^2 = \frac{1}{1 + U_{N-1}^2(z) \frac{1 - |t(k)|^2}{|t(k)|^2}}, \quad (4.3)$$

where $z = \cos(\alpha_t(k) + kd)/|t(k)|$, $\alpha_t(k) = \arg t(k)$, and the $U_N(z)$ are the Chebyshev's polynomial of the second kind, satisfying the recurrence relation¹¹

$$U_N(z) - 2zU_{N-1}(z) + U_{N-2}(z) = 0 \quad (4.4)$$

and boundary conditions $U_{-1}(z) = 0$, $U_0(z) = 1$. In the following we shall also need the identity

$$U_{N-1}^2(z) + U_{N-2}^2(z) - 2zU_{N-1}(z)U_{N-2}(z) = 1. \quad (4.5)$$

It immediately follows from Eq. (4.3) that, for a given incoming momentum k , the resonance condition $|T_N(k)|^2 = 1$ occurs when either $|t(k)|^2 = 1$ (the single potential is transparent at this energy) or $U_{N-1}(z) = 0$. In the former case, the resonance is not affected by a variation of the distance d separating the potentials. In the latter case, the resonances are determined by the zeros of $U_{N-1}(z)$, i.e.,

$$\cos(\alpha_t(k) + kd)/|t(k)| = \cos(j\pi/N), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (4.6)$$

and therefore, for a given $k \neq 0$, there is always an infinite number of resonance distances $d \geq a$, for which the transmission probability is unity.

Consider now the low energy behavior of the resonance conditions (4.6). In the exceptional case $|t(0)|^2 \neq 0$, it immediately follows from Eq. (4.3) that $|T_N(0)|^2 \neq 0$ [and $|T_N(0)|^2 = 1$ if $|t(0)|^2 = 1$] so that, if $v(x)$ supports a “half bound state” (or a zero-energy resonance), the same is true for $V_N(x)$, for all $d \geq a$. On the other hand, in the generic case

$$|t(k)|^2 = ck^2 + O(k^4), \quad c > 0, \quad (4.7)$$

the resonant conditions (4.6) become [use $\alpha_t(k) = -\alpha_t(-k)$, by Eq. (2.2), and Eq. (2.6)]

$$\frac{h+d}{\sqrt{c}} + O(k^2) = \cos(j\pi/N), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (4.8)$$

where $h = \lim_{k \rightarrow 0} \alpha_t'(k)$ is the zero-energy spatial shift for $v(x)$ and c is the positive constant appearing in Eq. (4.7). Thus, contrary to the case $k \neq 0$, as $k \rightarrow 0$, there are at most $N-1$ resonance distances

$$d_j = -h + \sqrt{c} \cos(j\pi/N), \quad j = 1, \dots, N-1, \quad (4.9)$$

for which the transmission probability is unity. Notice however that, since we must have $d \geq a$, a resonance condition, say $d = d_j$, can be realized only if $d_j \geq a$, which can be the case or not, depending on the given choice of the single potential $v(x)$.

We are now in position to state our result, which relates the zero-energy resonance conditions (4.9) to the structure of the bound state spectrum of $V_N(x)$.

Proposition 2.

- (A) Assume that $v(x)$ has n bound states. If one can find a distance $d \geq a$ such that
- (i) $d > d_1$, then $V_N(x)$ has Nn bound states;
 - (ii) $d_{j+1} < d < d_j$, $j = 1, \dots, N-2$, then $V_N(x)$ has $Nn - j$ bound states;
 - (iii) $d < d_{N-1}$, then $V_N(x)$ has $Nn - (N-1)$ bound states;
 - (iv) $d = d_j$, $j = 1, \dots, N-1$, then $V_N(x)$ has $Nn - j$ bound states and a zero-energy resonance;
- (B) Assume that $v(x)$ has in addition a “half bound state”. Then, $V_N(x)$ has Nn bound states and a “half bound state” for all $d \geq a$.

Proof. We shall proceed by a recursion procedure. From Proposition 1, the result clearly holds for $N = 2$. We assume it holds for some fixed N , $2 \leq N \leq N'$, and have to prove it for $N = N' + 1$.

(A) We introduce the notation $\rho = (h+d)/\sqrt{c}$ and consider first the “distances” of the form $\rho = \cos(m\pi/N)$, $1 \leq m \leq N-1$, $2 \leq N \leq N'$. For this, we write the potential

as the sum $V_{N'+1}(x) = V_N(x) + V_{N'-N+1}(x - Nd)$, $2 \leq N \leq N'$. Then, according to Eqs. (3.5),(3.6), the phase $\alpha_{N'+1} \equiv \alpha_{T_{N'+1}}$ may be written as

$$\alpha_{N'+1} = \alpha_N + \alpha_{N'-N+1} + A. \quad (4.10)$$

By hypothesis, $V_N(x)$ supports $Nn - m$ bound states and a zero-energy resonance, and it follows from points (B) and (C) of Proposition 1 that $A = 0$. Thus,

$$\alpha_{N'+1} = (Nn - m)\pi + \alpha_{N'-N+1}. \quad (4.11)$$

To determine $\alpha_{N'-N+1}$, we distinguish, for $N \neq N'$, the following two possibilities: there exist $1 \leq m' \leq N' - N$, such that (a)

$$\frac{m}{N} = \frac{m'}{N' - N + 1} \quad (4.12)$$

or (b)

$$\frac{m'}{N' - N + 1} < \frac{m}{N} < \frac{m' + 1}{N' - N + 1}. \quad (4.13)$$

In case (a), by assumption, $\alpha_{N'-N+1} = ((N' - N + 1)n - m')\pi$, and hence

$$\alpha_{N'+1} = ((N' + 1)n - (m + m'))\pi. \quad (4.14)$$

Moreover, Eq. (4.12) is equivalent to $m/N = (m + m')/(N' + 1)$, implying $\rho = \cos((m + m')\pi/(N' + 1))$, in accordance with (iv). In case (b), we have

$$\cos\left(\frac{m' + 1}{N' - N + 1}\right) < \rho < \cos\left(\frac{m'}{N' - N + 1}\right). \quad (4.15)$$

Thus, by assumption, $\alpha_{N'-N+1} = ((N' - N + 1)n - m' - \frac{1}{2})\pi$, yielding

$$\alpha_{N'+1} = \left((N' + 1)n - (m + m') - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad (4.16)$$

which is in agreement with (ii), since Eq. (4.13) is equivalent to

$$\frac{m + m'}{N' + 1} < \frac{m}{N} < \frac{m + m' + 1}{N' + 1}, \quad (4.17)$$

so that

$$\cos\left(\frac{m + m' + 1}{N' + 1}\right) < \rho < \cos\left(\frac{m + m'}{N' + 1}\right). \quad (4.18)$$

For $N = N'$, $\alpha_{N'-N+1} = \alpha_t = (n - 1/2)\pi$, and

$$\alpha_{N'+1} = (N'n - m)\pi + \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi = \left((N' + 1)n - m - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad (4.19)$$

which agrees with (ii), if we set $m' = 0$ in (4.17),(4.18).

Consider now the case $\rho \neq \cos(m\pi/N)$, $1 \leq m \leq N - 1$, $2 \leq N \leq N'$. Then, by assumption, none of the potentials $V_N(x)$, $N = 2, \dots, N'$, has a zero-energy resonance. Thus, writing the potential as the sum $V_{N'+1}(x) = V_{N'}(x) + v(x - N'd)$, we can apply part (A) of Proposition 1. Setting $\alpha \equiv \alpha_t$, and observing that the distance between the centers of $V_{N'}(x)$ and $v(x - N'd)$ is $(N' + 1)d/2$, we obtain

$$\alpha_{N'+1} = \alpha_{N'} + \alpha + A, \quad (4.20)$$

with

$$A = \begin{cases} \pi/2 & \text{if } H_{N'} + h + (N' + 1)d > 0 \\ 0 & \text{if } H_{N'} + h + (N' + 1)d = 0 \\ -\pi/2 & \text{if } H_{N'} + h + (N' + 1)d < 0. \end{cases} \quad (4.21)$$

Here, $H_{N'}$ denotes the zero-energy limit of the spatial shift for $V_{N'}(x)$. On the other hand, Eqs. (3.10),(3.11) give (with obvious notation)

$$C_{N'-1} = \frac{C_{N'-2} c}{(H_{N'-2} + h + (N' - 1)d)^2}, \quad C_1 = c \quad (4.22)$$

and, with $H_1 = h$,

$$H_{N'} = H_{N'-1} + h - \frac{1}{2}(H_{N'-1} + h + N'd) - \frac{1}{2} \frac{C_{N'-1} + c}{H_{N'-1} + h + N'd}. \quad (4.23)$$

Setting $F_{N'} \equiv (H_{N'} + h + (N' + 1)d)/\sqrt{c}$, we have $F_1 = 2\rho$, and Eq. (4.22) becomes

$$C_{N'-1} = \frac{C_{N'-2}}{F_{N'-2}^2} = \frac{C_{N'-3}}{F_{N'-2}^2 F_{N'-3}^2} = \dots = \frac{c}{F_{N'-2}^2 \dots F_1^2}. \quad (4.24)$$

Moreover, Eq. (4.23) gives

$$\begin{aligned} F_{N'} &= \frac{1}{2} \left(F_{N'-1} - \frac{1}{c} \frac{C_{N'-1} + c}{F_{N'-1}} + 2\rho \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(F_{N'-1} - \frac{1}{F_{N'-1}} - \frac{1}{F_{N'-1} F_{N'-2}^2 \dots F_1^2} + 2\rho \right), \end{aligned} \quad (4.25)$$

where, for the second equality, we have used Eq. (4.24). Then, defining

$$U_{N'} \equiv F_1 \dots F_{N'}, \quad (4.26)$$

we have $F_{N'} = U_{N'}/U_{N'-1}$ and, after multiplication by $U_{N'-1}U_{N'-2}$, Eq. (4.25) yields

$$U_{N'}U_{N'-2} = \frac{1}{2} \left(U_{N'-1}^2 - U_{N'-2}^2 - 1 + 2\rho U_{N'-1}U_{N'-2} \right). \quad (4.27)$$

Multiplying Eq. (4.4) by U_{N-2} and using Eq. (4.5), one finds that Eq. (4.27) defines the Chebyshev's polynomials of the second kind, with argument $z = \rho$. In other terms, we have shown that Eq. (4.21) may be written in the alternative form

$$A = \begin{cases} \pi/2 & \text{if } U_{N'}/U_{N'-1} > 0 \\ 0 & \text{if } U_{N'}/U_{N'-1} = 0 \\ -\pi/2 & \text{if } U_{N'}/U_{N'-1} < 0 \end{cases} \quad (4.28)$$

Assume first $\rho > \cos(\pi/(N'+1)) > \cos(\pi/N')$. Then, since the coefficient of ρ^N in the N^{th} degree polynomial is unity, $U_{N'}/U_{N'-1} > 0$, so that $A = \pi/2$. Moreover, by assumption, $\alpha_{N'} = (N'n - \frac{1}{2})\pi$. Hence, Eq. (4.20) gives

$$\alpha_{N'+1} = \left(N'n - \frac{1}{2}\right)\pi + \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi + \frac{\pi}{2} = \left((N'+1)n - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad (4.29)$$

which is the desired result, in view of Eq. (2.6). Next, we assume

$$\cos\left(\frac{(m+1)\pi}{N'+1}\right) < \rho < \cos\left(\frac{m\pi}{N'+1}\right), \quad m = 1, \dots, N'-1. \quad (4.30)$$

Two consecutive zeros of $U_{N'}$ bracket exactly one zero of $U_{N'-1}$. More precisely,

$$\cos\left(\frac{(m+1)\pi}{N'+1}\right) < \cos\left(\frac{m\pi}{N'}\right) < \cos\left(\frac{m\pi}{N'+1}\right), \quad m = 1, \dots, N'-1. \quad (4.31)$$

If

$$\cos\left(\frac{m\pi}{N'}\right) < \rho < \cos\left(\frac{m\pi}{N'+1}\right) < \cos\left(\frac{(m-1)\pi}{N'}\right), \quad (4.32)$$

then, $\text{sgn } U_{N'} = (-1)^m$, $\text{sgn } U_{N'-1} = (-1)^{m-1}$ and $\text{sgn}(U_{N'}/U_{N'-1}) = -1$, implying

$$\alpha_{N'+1} = \left(N'n - (m-1) - \frac{1}{2}\right)\pi + \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi - \frac{\pi}{2} = \left((N'+1)n - m - \frac{1}{2}\right)\pi, \quad (4.33)$$

and we conclude by Eq. (2.6). On the other hand, if

$$\cos\left(\frac{(m+1)\pi}{N'}\right) < \cos\left(\frac{(m+1)\pi}{N'+1}\right) < \rho < \cos\left(\frac{m\pi}{N'}\right), \quad (4.34)$$

then, $\text{sgn } U_{N'} = \text{sgn } U_{N'-1} = (-1)^m$ and $\text{sgn}(U_{N'}/U_{N'-1}) = 1$, implying

$$\alpha_{N'+1} = \left(N'n - m - \frac{1}{2}\right)\pi + \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi + \frac{\pi}{2} = \left((N'+1)n - m - \frac{1}{2}\right)\pi. \quad (4.35)$$

In the same way, for the case $\rho < \cos(N'\pi/(N'+1)) < \cos((N'-1)\pi/N')$, we have $\text{sgn } U_{N'} = (-1)^{N'}$, $\text{sgn } U_{N'-1} = (-1)^{N'-1}$ and $\text{sgn}(U_{N'}/U_{N'-1}) = -1$, implying

$$\alpha_{N'+1} = \left(N'n - (N'-1) - \frac{1}{2}\right)\pi + \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi - \frac{\pi}{2} = \left((N'+1)n - N' - \frac{1}{2}\right)\pi. \quad (4.36)$$

Finally, consider the case $\rho = \cos(m\pi/(N' + 1))$, $m = 1, \dots, N'$. Then, $A = 0$ and

$$\cos\left(\frac{m\pi}{N'}\right) < \cos\left(\frac{m\pi}{N'+1}\right) < \cos\left(\frac{(m-1)\pi}{N'}\right). \quad (4.37)$$

Thus,

$$\alpha_{N'+1} = \left(N'n - (m-1) - \frac{1}{2}\right)\pi + \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi = ((N'+1)n - m)\pi \quad (4.38)$$

and we conclude by Eq. (2.7).

(B) If $v(x)$ supports a “half bound state”, then $\alpha = n\pi$ and, by points (B) and (C) of Proposition 1, $A = 0$. Thus,

$$\alpha_{N'+1} = \alpha_{N'} + n\pi = \alpha_{N'-1} + 2n\pi = \dots = \alpha + N'n\pi = (N'+1)n\pi, \quad (4.39)$$

for all $d \geq a$, which is the desired result, according to Eq. (2.7).

It is not difficult to check that, for a nonsymmetric $v(x)$, the result of Proposition 2 remains true. For this, notice that (4.3) holds for any shape of the composing potential $v(x)$, so the same is true for the resonance conditions (4.9). For a nonsymmetric $v(x)$ the proof remains essentially the same, apart from the case $\rho \neq \cos(m\pi/N)$ where one has to use the condition $\alpha'_{r_1} + \alpha'_{l_2} + 2d$ instead of $h_1 + h_2 + 2d$, and the corresponding formulae for the reflection coefficients^{3,4}.

Condition (i) is always realized for a d sufficiently large and is consistent with the limiting case of N infinitely separated potentials. As d approaches one of the resonance distances (4.9), for instance d_1 , a bound-state level approaches the onset of the continuum and give rise to a vanishing reflection coefficient at threshold. Then, the zero-energy “bound-state” becomes unbound when $d < d_1$, and transforms into a resonance. In other terms, a superlattice composed of N identical potentials admits, in general, at most $N - 1$ zero-energy resonance distances and can lose at most $N - 1$ bound-states by decreasing the spacing d separating the potentials. On the contrary, if the composing potential supports itself a “half bound-state” (point (B) of the proposition), then the number of bound-states of the entire superlattice remains constant as the “period” d varies.

To illustrate the content of Proposition 2, we have plotted in Figure 1 the bound-state levels and resonances for a system of $N = 7$ attractive delta-function potentials $\lambda\delta(x)$, $\lambda < 0$, as a function of $d \geq 0$ ($a = 0$ for a delta-function potential). In this case $h = -\sqrt{c} = -1/m|\lambda|$, where m is the mass of the incoming particle and we have set $\hbar = 1$. In the limiting case $d \rightarrow \infty$, $V_N(x)$ has one bound-state level of energy $E = -m\lambda^2/2$, seven times degenerate, which corresponds to the only bound-state level of the single potential. In accordance with point (A) of the proposition, the superlattice loses, one by one, six of its seven bound-states (which transform into resonances) as d approaches each of the resonant distances $d_j = \frac{1}{m|\lambda|}(1 - \cos(j\pi/7))$, $j = 1, \dots, 6$. Finally, for $d = 0$, the

seven delta-function potentials are superimposed at the origin and one is left with only one bound-state of energy $-m(7\lambda)^2/2$. For the plot we have chosen $\lambda = -4$ and $m = 1$.

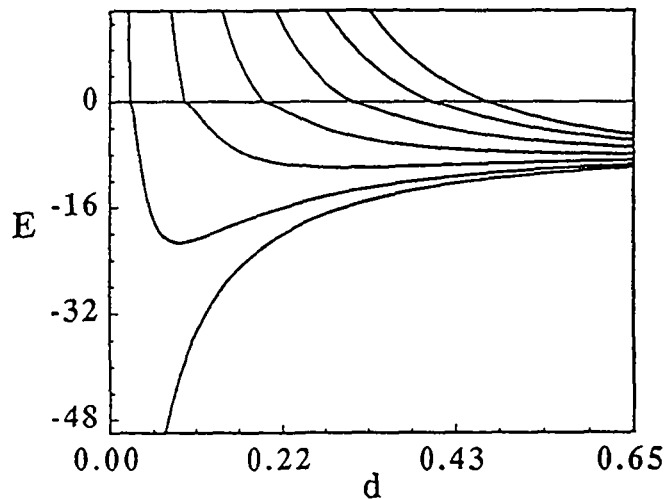


Fig. 1. Bound-state levels and resonances of a superlattice of $N = 7$ attractive delta-function potentials $\lambda\delta(x)$, as a function of the "period" $d \geq 0$. The plot is for $\lambda = -4$ and $m = 1$.

Figure 2 illustrates point (B) of Proposition 2. For this, we have considered the single potential $v(x) = \lambda(\delta(x) + \delta(x - \frac{1}{m|\lambda|}))$, which has exactly one bound-state and a zero-energy resonance. Contrary to the case of Figure 1, we now observe that the number of bound-states remains constant as d varies from infinity to $a = 1/m|\lambda|$.

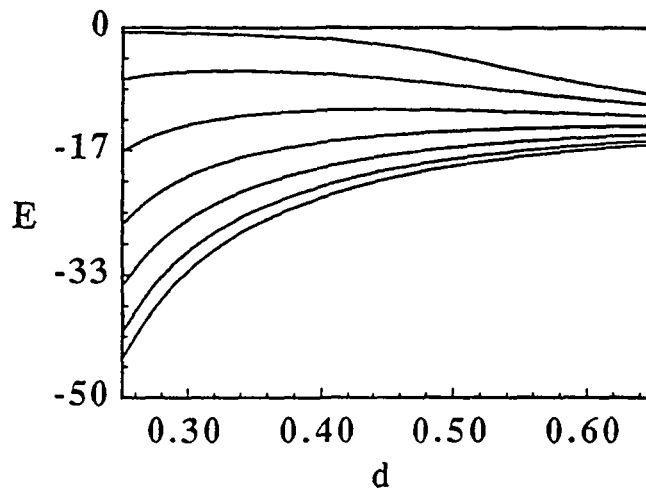


Fig. 2. Bound-state levels of a superlattice of $N = 7$ double delta-function potentials $\lambda(\delta(x) + \delta(x - \frac{1}{m|\lambda|}))$, as a function of the "period" $d \geq 1/m|\lambda|$. The plot is for $\lambda = -4$ and $m = 1$.

A comment is in order. According to Proposition 2, one may be tempted to conclude that a multipotential system of N non-overlapping potentials can only lose bound-states

by decreasing the distances separating the potentials. However, this is true only in the case where all the distances and potentials are the same i.e., in the special case of a finite periodic potential. To see this, consider for instance the potential $v(x) + v(x - d) + v(x - d - \gamma)$, where $d \geq a$ and $\gamma > 0$ is fixed. It is then an easy exercise to show that the system loses a bound-state when d decreases below the value $-h + \frac{1}{2}(\sqrt{\gamma^2 + c} - \gamma)$, but subsequently gets it back at $d = -h$, when the double-potential $v(x) + v(x - d)$ has a zero-energy resonance.

5. A lower bound for the time delay at threshold

For the potential $v(x)$, with support in the interval $[-a/2, a/2]$, we define the reduced time delay

$$\tilde{\tau}(k) = \frac{k}{ma} \tau(k) = \frac{1}{a} h(k) = \frac{1}{a} \alpha'_t(k). \quad (5.1)$$

For a classical particle, causality implies $\tilde{\tau}_{cl}(k) \geq -1$, for all k . In quantum mechanics, the same lower bound holds, in general, in the high energy limit¹⁰. In Ref. 5, it was shown that it also holds in the low energy limit, when the potential has no bound state solutions. Actually, according to the analysis hereabove, a stronger lower bound can be proven in this case. More precisely, we have the following

Proposition 3. *Let $v(x)$ be a finite range potential, with support in the interval $I = [-a/2, a/2]$, supporting no bound state solutions. Then,*

$$\tilde{\tau} = \lim_{k \rightarrow 0} \tilde{\tau}(k) \geq -1 + \frac{\sqrt{c}}{a}. \quad (5.2)$$

Proof. According to Proposition 2, one has, for $a \leq d \leq d_1 = -h + \sqrt{c} \cos(\pi/N)$, $\alpha_N \leq (Nn - 1)\pi$. If the potential has no bound states, then $n = 0$ and $\alpha_N \leq -\pi$, in contradiction with Levinson's theorem (2.6),(2.7). Thus $a > -h + \sqrt{c} \cos(\pi/N)$ or, equivalently,

$$\tilde{\tau} > -1 + \cos(\pi/N) \frac{\sqrt{c}}{a}. \quad (5.3)$$

Then, taking the limit $N \rightarrow \infty$, we find (5.2).

Consider, as an illustration, the case $v(x) = \lambda \chi_I(x)$, $\lambda > 0$. Then, a straightforward calculation yields

$$\tilde{\tau} = -1 + \cosh(\sqrt{2m\lambda}a) \frac{\sqrt{c}}{a}, \quad \sqrt{c} = \frac{2}{\sqrt{2m\lambda} |\sinh(\sqrt{2m\lambda}a)|}, \quad (5.4)$$

in agreement with Proposition 3, since $\cosh(\sqrt{2m\lambda}a) \geq 1$. It is worth noting that, in the limit of a delta-function potential ($\lambda \rightarrow \lambda/a$, $a \rightarrow 0$), $\cosh(\sqrt{2m\lambda}a) \rightarrow 1$. Hence, the inequality (5.2) is in fact an equality in this special case.

References

- [1] R. Tsu, L. Esaki, *Appl. Phys. Lett.* **22**, 562 (1973).
- [2] F. Capasso, G. Margaritondo, *Heterojunctions band Discontinuities: Physics and Device Applications*, North-Holland, Amsterdam, (1987).
- [3] D.W.L. Sprung, Hua Wu, J. Martorell, *Am. J. Phys.* **61**, 1118 (1993).
- [4] M.G. Rozman, P. Reineker, R. Tehver, *Phys. Lett. A* **187**, 127 (1994).
- [5] M. Sassoli de Bianchi, *J. Math. Phys.* **35**, 2719 (1994).
- [6] L. D. Faddeev: *Am. Math. Soc. Transl.* **2**, 139 (1964).
- [7] P. Deift, E. Trubowitz: *Commun. Pure Appl. Math.* **32**, 121 (1979).
- [8] P. Senn, *Am. J. Phys.* **56**, 916 (1988).
- [9] T. Aktosun: *J. Math. Phys.* **33**, 3865 (1992).
- [10] Ph. A. Martin: *Acta Phys. Austriaca, Suppl.* **23**, 159 (1981).
- [11] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, 2nd ed. (Academic, New York, 1970) 13.3.13, pp. 624-631 .

VIII. Sur la propriété de factorisation de la matrice de diffusion pour une particule avec masse dépendante de la position

1. Introduction

Pour le problème de diffusion unidimensionnel, les éléments de la matrice de diffusion peuvent s'exprimer en termes des éléments des matrices de diffusion associées aux fragments de ce potentiel. Dans l'article qui suit nous dérivons cette propriété de factorisation dans le cadre plus général d'une particule dont la masse $m(x)$ varie avec la position. La méthode nous permettra aussi de dériver pour les amplitudes de diffusion des équations différentielles non linéaires, du premier ordre, qui présentent des grands avantages dans le calcul numérique.

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura, *Differential equations and factorization property for the one-dimensional Schrödinger equation with position-dependent mass*, à paraître dans Eur. J. Phys., 1995.

Differential equations and factorization property for the one-dimensional Schrödinger equation with position-dependent mass

M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

M. Di Ventura

Institut de Physique Appliquée-LTHS, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. The variable phase method is applied to the one-dimensional Schrödinger equation with position-dependent (effective) mass, to derive first-order differential equations for the transmission and reflection amplitudes, and bound-state energies, which are particularly convenient for numerical computations. When the mass and potential have the same asymptotic at both ends of the real line, the method also allows to prove a factorization property of the scattering matrix.

1. Introduction

The study of semiconductor heterostructures and their transport properties has given rise, in recent years, to a veritable exponential growth of one-dimensional model calculations (see for instance [1], for a recent paper in this journal). Indeed, in nearly all the situations of practical interest, the device dimensions perpendicular to the transport x -direction are greater than x -extension of the potential. This permits a separation of the three-dimensional Schrödinger equation into a two-dimensional free-electron motion and a one-dimensional effective problem [2].

Very interesting are the two recent papers [3],[4], where the transmission and reflection amplitudes of a finitely repeated periodic potential are shown to be entirely expressible in terms of the reflection and transmission amplitudes of the composing single potential. A consequence of this result is, for instance, the recover of Bloch zones, by letting the number of repetitions to approach infinity, and the possibility of characterizing the number of resonances and bound states of the entire lattice when the number of resonances and bound states of the single potential and the period are known [3-6]. The basic ingredient for these results is the factorization property for the one-dimensional scattering matrix, saying that the elements of the scattering matrix for a given potential are explicitly expressible in terms of the elements of the scattering matrices for the fragments of this potential (see [7] for a proof). An interesting point was raised in [4]: when one of

the fragments is of infinitesimal width, the factorization property is transformed into an ordinary differential equation which is particularly convenient for numerical computations of scattering amplitudes, especially when the potential has a complicated shape.

However, for a more realistic description of transport properties in semiconductors, one has to correct the Schrödinger equation by allowing the (effective) mass to vary with the position, according to the different materials composing the mesoscopic device [8,9]. This leads us to the purpose of the present paper which is twofold. To start with, we show how to adapt the variable phase method [10] to treat the one-dimensional Schrödinger problem with position-dependent mass, and derive first-order differential equations for the transmission and reflection amplitudes, and bound-state energies. These equations generalize the ones recently derived in [4], and the advantage of their use in numerical investigations will be demonstrated in an explicit example.

The second point is to derive the factorization property of the scattering matrix from the differential equations, by integration, in the special case where both the mass and potential have the same left and right asymptotic. As a consequence, all the results based on this property remain valid in the case of a position-dependent mass.

2. The scattering matrix

The correct form for the one-dimensional stationary Schrödinger equation with a position-dependent effective mass $m(x)$, is [7,8],

$$\left[\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m(x)} \frac{d}{dx} + E - v(x) \right] \psi(k, x) = 0, \quad (2.1)$$

where $x \in \mathbb{R}$ is the space coordinate, $E = k^2/2m$ the energy, m a given reference mass, and $v(x)$ the potential. We assume that $(v(x), m(x)) = (v_-, m_-)$ if $x \leq x_-$, and $(v(x), m(x)) = (v_+, m_+)$ if $x \geq x_+$, and that $E \geq v_{\pm} \geq 0$. Then, (2.1) admits two physical solutions ψ_ℓ from the left and ψ_r from the right, which satisfy the boundary conditions

$$\psi_\ell(k, x) = \begin{cases} e^{ik_-x} + L(k)e^{-ik_-x} & x \leq x_- \\ \sqrt{\frac{v_-}{v_+}} T_\ell(k) e^{ik_+x} & x \geq x_+ \end{cases} \quad (2.2)$$

and

$$\psi_r(k, x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{v_+}{v_-}} T_r(k) e^{-ik_-x} & x \leq x_- \\ e^{-ik_+x} + R(k) e^{ik_+x} & x \geq x_+, \end{cases} \quad (2.3)$$

where we have defined the asymptotic (group) velocities $v_{\pm} = k_{\pm}/m_{\pm}$, and momenta $k_{\pm} = k \sqrt{\frac{m_{\pm}}{m} (1 - \frac{v_{\pm}}{E})}$. Here T_ℓ and T_r are the transmission amplitudes from the left and from the right, respectively, and L and R are the reflection amplitudes from the left and from the right, respectively. Notice that energy conservation is expressed by the equality $E = k_{\pm}^2/2m_{\pm} + v_{\pm}$. The scattering matrix $S(k)$ is defined as

$$S(k) = \begin{pmatrix} T_\ell(k) & R(k) \\ L(k) & T_r(k) \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

To derive its basic properties, we observe that since k appears as k^2 in (2.1), $\psi_\ell(-k, x)$ and $\psi_r(-k, x)$ are also solutions of (2.1) whenever $\psi_\ell(k, x)$ and $\psi_r(k, x)$ are the physical solutions. Since $k_\pm(-k) = -k_\pm(k)$, we have $\psi_\ell^*(-k, x) = \psi_\ell(k, x)$ and $\psi_r^*(-k, x) = \psi_r(k, x)$, implying that

$$S(-k)^* = S(k). \quad (2.5)$$

To show that $S(k)$ is unitary, let $[f, g] = f(x)m^{-1}(x)g'(x) - g(x)m^{-1}(x)f'(x)$ denotes the (generalized) Wronskian of f and g , where the prime is for the derivative with respect to x . Clearly, $[f, g]$ is independent of x . Hence, from the Wronskian of $\psi_\ell(k, x)$ and $\psi_\ell(-k, x)$ (using the left and right asymptotic forms), we obtain

$$T_\ell(k)T_\ell(-k) + L(k)L(-k) = 1, \quad (2.6)$$

from the Wronskian of $\psi_r(k, x)$ and $\psi_r(-k, x)$, we obtain

$$T_r(k)T_r(-k) + R(k)R(-k) = 1, \quad (2.7)$$

and from the Wronskian of $\psi_\ell(k, x)$ and $\psi_r(-k, x)$, we get

$$T_\ell(k)R(-k) + L(k)T_r(-k) = 0. \quad (2.8)$$

Equations (2.6)-(2.8), together with (2.5), prove the unitarity of $S(k)$. Finally, considering the Wronskian of $\psi_\ell(k, x)$ with $\psi_r(k, x)$, one finds that $T_\ell(k) = T_r(k)$ i.e., the transmission amplitudes from the left and right coincide, and we shall simply denote by $T(k)$ their common value.

For later purpose, we also define the matrix

$$\Lambda(k) = \begin{pmatrix} \frac{1}{T(k)} & -\frac{R(k)}{T(k)} \\ \frac{L(k)}{T(k)} & \frac{1}{T^*(k)} \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

associated with the scattering matrix $S(k)$. From the properties of $S(k)$, it follows that $\det \Lambda(k) = 1$, and

$$\Lambda^*(k) = Q\Lambda(k)Q, \quad Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.10)$$

3. Differential equations for the scattering amplitudes

To derive differential equations for the elements of the scattering matrix (2.4), it will be useful to introduce the Jost solutions

$$f_\ell(k, x) = \sqrt{\frac{\nu_+}{\nu_-}} \frac{1}{T(k)} \psi_\ell(k, x), \quad f_r(k, x) = \sqrt{\frac{\nu_-}{\nu_+}} \frac{1}{T(k)} \psi_r(k, x), \quad (3.1)$$

with boundary conditions

$$f_\ell(k, x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{\nu_+}{\nu_-}} \left[e^{ik-x} \frac{1}{T(k)} + \frac{L(k)}{T(k)} e^{-ik-x} \right], & x \leq x_- \\ e^{ik+x} & x \geq x_+ \end{cases} \quad (3.2)$$

and

$$f_r(k, x) = \begin{cases} e^{-ik-x} & x \leq x_- \\ \sqrt{\frac{\nu_-}{\nu_+}} \left[e^{-ik+x} \frac{1}{T(k)} + \frac{R(k)}{T(k)} e^{ik+x} \right] & x \geq x_+. \end{cases} \quad (3.3)$$

For any given potential $v(x)$ and effective mass $m(x)$, we introduce two new potentials $v_\ell(\rho, x)$ and $v_r(\rho, x)$, and masses $m_\ell(\rho, x)$ and $m_r(\rho, x)$, which are defined by truncating from the left and from the right, respectively, $v(x)$ and $m(x)$ at $x = \rho$; that is:

$$v_\ell(\rho, x) = \begin{cases} v_-, & x \leq \rho \\ v(x), & x > \rho, \end{cases} \quad m_\ell(\rho, x) = \begin{cases} m_-, & x \leq \rho \\ m(x), & x > \rho \end{cases} \quad (3.4)$$

and

$$v_r(\rho, x) = \begin{cases} v(x), & x < \rho \\ v_+, & x \geq \rho, \end{cases} \quad m_r(\rho, x) = \begin{cases} m(x), & x < \rho \\ m_+, & x \geq \rho. \end{cases} \quad (3.5)$$

We denote by $f_\ell^\rho(k, x)$ and $f_r^\rho(k, x)$ the Jost solutions associated with the couples (3.4) and (3.5), respectively. For any $\rho \in \mathbb{R}$, the two functions $f_\ell(k, x)$ and $f_\ell^\rho(k, x)$ (respectively $f_r(k, x)$ and $f_r^\rho(k, x)$), are defined by the same boundary condition at $x = x_+$ (respectively $x = x_-$), and satisfy the same differential equation for $x > \rho$ (respectively $x < \rho$). It then follows that $f_\ell^\rho(k, x) = f_\ell(k, x)$ for $x > \rho$, and $f_r^\rho(k, x) = f_r(k, x)$ for $x < \rho$.

Let us first restrict our attention to the right solutions. Beyond the point $x = \rho$ the two solutions $f_r(k, x)$ and $f_r^\rho(k, x)$ differ. In particular, for $x \geq \rho$, $f_r^\rho(k, x)$ has the asymptotic form (from now on, we drop from the notation the argument k)

$$f_r^\rho(x) = \sqrt{\frac{\nu_-}{\nu_+}} \left[e^{-ik+x} \frac{1}{T_\rho} + \frac{R_\rho}{T_\rho} e^{ik+x} \right] \quad (3.6)$$

and

$$\frac{1}{m_+} f_r^{\rho'}(x) = -i\sqrt{\nu_+\nu_-} \left[e^{-ik+x} \frac{1}{T_\rho} - \frac{R_\rho}{T_\rho} e^{ik+x} \right]. \quad (3.7)$$

Since $f_r^\rho(x)$ is continuous and coincide with $f_r(x)$ for $x < \rho$, we have for $x = \rho$:

$$f_r(\rho) = \sqrt{\frac{\nu_-}{\nu_+}} \left[e^{-ik+\rho} \frac{1}{T_\rho} + \frac{R_\rho}{T_\rho} e^{ik+\rho} \right]. \quad (3.8)$$

In the same way, from the continuity of $m_+^{-1} f_r^{\rho'}(x)$ at $x = \rho$, we also find¹

$$\frac{1}{m(\rho)} f_r'(\rho) = -i\sqrt{\nu_+\nu_-} \left[e^{-ik+\rho} \frac{1}{T_\rho} - \frac{R_\rho}{T_\rho} e^{ik+\rho} \right]. \quad (3.9)$$

¹ We recall that, contrary to the case of a constant mass, it is the derivative of the wave function, divided by the mass $m(x)$, that has to be continuous in x [8,9].

The identities (3.8) and (3.9) hold for any choice of ρ , so one can replace ρ by x . Comparing $m^{-1}(x)$ times the derivative of (3.8) with (3.9), we obtain the identity

$$\left[\left(\frac{1}{T_x} \right)' e^{-ik_+x} + \left(\frac{R_x}{T_x} \right)' e^{ik_+x} \right] = 2b_+(x) \left[\frac{1}{T_x} e^{-ik_+x} - \frac{R_x}{T_x} e^{ik_+x} \right], \quad (3.10)$$

where we have defined

$$b_{\pm}(x) = \pm \frac{k_{\pm}}{2i} \left(\frac{m(x)}{m_{\pm}} - 1 \right). \quad (3.11)$$

Furthermore, deriving (3.9), then substituting it into the Schrödinger equation (2.1), one finds

$$\left[\left(\frac{1}{T_x} \right)' e^{-ik_+x} - \left(\frac{R_x}{T_x} \right)' e^{ik_+x} \right] = 2a_+(x) \left[\frac{1}{T_x} e^{-ik_+x} + \frac{R_x}{T_x} e^{ik_+x} \right], \quad (3.12)$$

where

$$a_{\pm}(x) = \pm \frac{k_{\pm}}{2i} \left(\frac{E - v(x)}{E - v_{\pm}} - 1 \right). \quad (3.13)$$

Finally, combining (3.10) with (3.12), one finds, after a straightforward calculation, first-order differential equations for the transmission and reflection amplitudes:

$$\begin{aligned} R'_x &= e^{-2ik_+x} \left[b_+(x) \left(R_x e^{2ik_+x} - 1 \right)^2 - a_+(x) \left(R_x e^{2ik_+x} + 1 \right)^2 \right] \\ T'_x &= T_x \left[b_+(x) \left(R_x e^{2ik_+x} - 1 \right) - a_+(x) \left(R_x e^{2ik_+x} + 1 \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.14)$$

According to (3.5), R_{x_+} and T_{x_+} , are just the desired reflection and transmission coefficient R and T for the couple $(v(x), m(x))$. To find the initial condition we observe that $v_r(x_-, x)$ and $m_r(x_-, x)$ are, respectively, a potential and mass step situated at $x = x_-$. Thus, one has to impose to (3.14) the initial boundary conditions

$$R_{x_-} = \frac{\nu_+ - \nu_-}{\nu_+ + \nu_-} e^{-2ik_+x_-}, \quad T_{x_-} = \frac{2\sqrt{\nu_+\nu_-}}{\nu_+ + \nu_-} e^{i(k_- - k_+)x_-}. \quad (3.15)$$

The calculation for the left solution is similar. It yields the equations

$$\begin{aligned} L'_x &= e^{2ik_-x} \left[b_-(x) \left(L_x e^{-2ik_-x} - 1 \right)^2 - a_-(x) \left(L_x e^{-2ik_-x} + 1 \right)^2 \right] \\ T'_x &= T_x \left[b_-(x) \left(L_x e^{-2ik_-x} - 1 \right) - a_-(x) \left(L_x e^{-2ik_-x} + 1 \right) \right], \end{aligned} \quad (3.16)$$

and the boundary conditions are $L_{x_-} = L$, $T_{x_-} = T$, and

$$L_{x_+} = \frac{\nu_- - \nu_+}{\nu_+ + \nu_-} e^{2ik_-x_+}, \quad T_{x_+} = \frac{2\sqrt{\nu_+\nu_-}}{\nu_+ + \nu_-} e^{i(k_- - k_+)x_+}. \quad (3.17)$$

4. Variable phase equations

For the case $v_- > E > v_+$, (the situation $v_+ > E > v_-$ being similar), the reflection probability is unity and all the information on the scattering process is contained in the phase of the reflection amplitude which we write as $R = -e^{i2\delta}$. Thus, inserting $R_x = -e^{i2\delta_x}$ into (3.14), then solving for δ_x , one arrives to the variable phase equation

$$\delta'_x = 2ib_+(x) \cos^2(\delta_x + k_+x) + 2ia_+(x) \sin^2(\delta_x + k_+x). \quad (4.1)$$

The boundary conditions are $\delta_{x_+} = \delta$, and (mod π)

$$\delta_{x_-} = -k_+x_- + \arctan\left(\frac{\nu_+}{\xi_-}\right), \quad (4.2)$$

where we have defined $\xi_- = \kappa_-/m_-$ and $\kappa_- = \sqrt{2m_-(v_- - E)}$. Notice that for the special case of a constant mass $m(x) = m$, $x_- = 0$, $v_+ = 0$, and $v_- \rightarrow \infty$, (4.1) reduces to (with the convention $\arctan(0) = 0$)

$$\delta'_x = -\frac{2m}{k}v(x) \sin^2(\delta_x + kx), \quad \delta_0 = 0, \quad (4.3)$$

which is the well known form of the variable phase equation for the s -wave phase shift in the three dimensional scattering by a symmetric potential [10].

5. Differential equations for the bound-state energies

Suppose that for some value of E , $1/T = 0$. Then, the Wronskian $[f_\ell, f_r] = 0$, and the left and right Jost solutions are linearly dependent. If $E < v_\pm$, according to (3.1),(3.2), they correspond to exponentially decreasing functions both as $x \rightarrow \infty$ and $x \rightarrow -\infty$ i.e., to a nondegenerate bound-state. Thus, setting $A = 1/T$ and $B = -R/T$, one can put the system (3.10),(3.12) into the form

$$\begin{aligned} A'_x &= (a(x) + b(x))A_x + (b(x) - a(x))e^{-2\kappa_+x}B_x \\ B'_x &= (a(x) - b(x))e^{2\kappa_+x}A_x - (a(x) + b(x))B_x \end{aligned} \quad (5.1)$$

where

$$a(x) = \frac{\kappa_+}{2} \left(\frac{E - v(x)}{E - v_+} - 1 \right), \quad b(x) = \frac{\kappa_+}{2} \left(\frac{m(x)}{m_+} - 1 \right), \quad (5.2)$$

and $\kappa_\pm = \sqrt{2m_\pm(v_\pm - E)}$. The initial boundary conditions are ($\xi_\pm = \kappa_\pm/m_\pm$)

$$A_{x_-} = \frac{\xi_+ + \xi_-}{2\sqrt{\xi_+\xi_-}} e^{(\kappa_- - \kappa_+)x_-}, \quad B_{x_-} = \frac{\xi_- - \xi_+}{2\sqrt{\xi_+\xi_-}} e^{(\kappa_- + \kappa_+)x_-}. \quad (5.3)$$

For E being an eigenenergy, one has to impose at $x = x_+$ the boundary condition $A_{x_+} = 0$ (and any value for B_{x_+}). More precisely, one has to solve (5.1)-(5.3) for all energies lying between $\min_x v(x)$ and $\min\{v_-, v_+\}$, then look for those energies which correspond to a vanishing A_x at $x = x_+$.

6. The factorization property

Let $\Lambda_+(x)$ be the matrix (2.9) associated with the truncated potential and mass at x , from the right. According to (3.10),(3.12), and to the property (2.10), it is a simple matter to check that $\Lambda_+(x)$ obeys the differential equation

$$\Lambda'_+(x) = \Lambda_+(x)M_+(x), \quad M_+(x) = \begin{pmatrix} (a_+ + b_+) & e^{-2ik_+x}(a_+ - b_+) \\ (b_+ - a_+)e^{2ik_+x} & -(a_+ + b_+) \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

with boundary conditions

$$\Lambda_+(x_-) = \begin{pmatrix} \frac{\nu_+ + \nu_-}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{i(k_+ - k_-)x_-} & \frac{\nu_- - \nu_+}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{-i(k_+ + k_-)x_-} \\ \frac{\nu_- - \nu_+}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{i(k_+ + k_-)x_-} & \frac{\nu_+ + \nu_-}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{i(k_- - k_+)x_-} \end{pmatrix}, \quad \Lambda_+(x_+) = \Lambda. \quad (6.2)$$

In the same way, one shows that the matrix $\Lambda_-(x)$, associated with the truncated potential and mass at x , from the left, obeys the equation

$$\Lambda'_-(x) = M_-(x)\Lambda_-(x), \quad M_-(x) = \begin{pmatrix} (a_- + b_-) & e^{-2ik_-x}(a_- - b_-) \\ (b_- - a_-)e^{2ik_-x} & -(a_- + b_-) \end{pmatrix}, \quad (6.3)$$

with boundary conditions

$$\Lambda_-(x_+) = \begin{pmatrix} \frac{\nu_+ + \nu_-}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{i(k_+ - k_-)x_+} & \frac{\nu_- - \nu_+}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{-i(k_+ + k_-)x_+} \\ \frac{\nu_- - \nu_+}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{i(k_+ + k_-)x_+} & \frac{\nu_+ + \nu_-}{2\sqrt{\nu_+\nu_-}} e^{i(k_- - k_+)x_+} \end{pmatrix}, \quad \Lambda_-(x_-) = \Lambda. \quad (6.4)$$

According to (6.1),(6.3), the derivative of the matrix product $\Lambda_+(x)\Lambda_-(x)$ is

$$(\Lambda_+(x)\Lambda_-(x))' = \Lambda_+(x)(M_+(x) + M_-(x))\Lambda_-(x). \quad (6.5)$$

In the special case where $m_+ = m_-$ and $v_+ = v_-$, one has $a_+(x) = -a_-(x)$ and $b_+(x) = -b_-(x)$, implying $M_+(x) = -M_-(x)$, and $(\Lambda_+(x)\Lambda_-(x))' = 0$. Thus, integrating the latter from x_- to x (or, equivalently, from x to x_+), and observing that $\Lambda_{\pm}(x_{\mp}) = I$, one finds

$$\Lambda = \Lambda_+(x)\Lambda_-(x). \quad (6.6)$$

Equation (6.6) is the factorization property. It tells us that the elements of the scattering matrix for a given mass and potential functions, admit a decomposition in terms of the elements of the scattering matrices corresponding to the fragments of that mass and potential.

7. Numerical example

A standard technique for solving (2.1) and calculating the scattering amplitudes is the transfer matrix [2] which is particularly suitable in problems where the potential can be approximated by a relatively small number of constant potentials. However, the transfer matrix method becomes impracticable in more realistic problems, when the potential shape is too complicated (problem of loss of significant digits). The equation we derived in this work overcome this difficulty and any potential and mass shape can in principle be dealt with.

As an example, we consider the system of Fig.1, which was proposed as a photoconductor device [11]. The potential and mass functions are

$$v(x) = \begin{cases} v_-, & x \leq 0 \\ v_- + v_1 \left(\frac{x}{d}\right)^2, & 0 < x \leq d \\ -v_2 - v_1 \left(\frac{x-2d}{d}\right)^2, & d < x \leq 2d \\ -v_2, & 2d < x \leq 3d \\ -v_2 - v_1 \left(\frac{x-3d}{d}\right)^2, & 3d < x \leq 4d \\ v_1 \left(\frac{x-5d}{d}\right)^2, & 4d < x \leq 5d \\ 0, & 5d < x \end{cases}, \quad m(x) = \begin{cases} m_1, & x \leq d \\ m_2, & d < x \leq 4d \\ m_3, & 4d < x, \end{cases} \quad (7.1)$$

where $d = 20\text{\AA}$, and the band-bending potential $v_1 = 50\text{ meV}$. We assumed the left barrier $v_- = 0.3\text{ eV}$ and the well depth $v_2 = 0.2\text{ eV}$. The electron effective masses are $m_1 = 0.1087 m_e$, $m_2 = 0.0670 m_e$, and $m_3 = 0.0837 m_e$, with m_e the free electron mass.

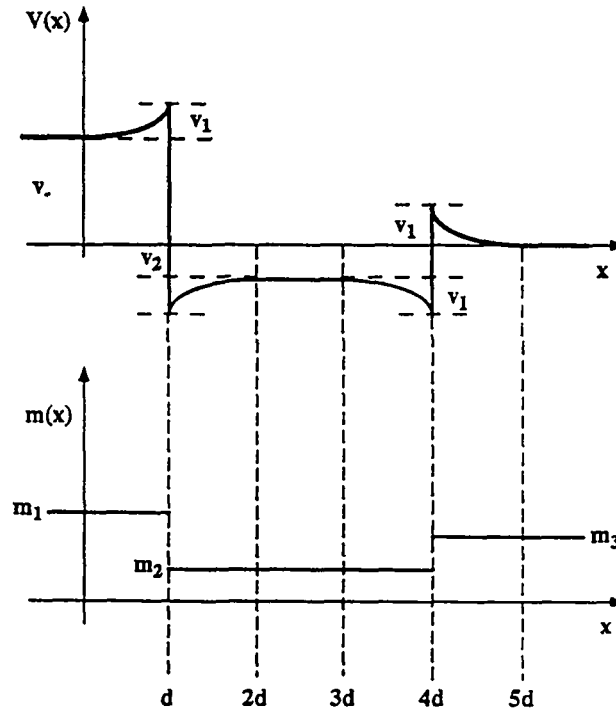


Fig. 1. Potential and mass functions of the photoconductor device.

Solving (3.14) for $E \geq v_-$, we have obtained the transmission probability $|T|^2 = 1 - |R|^2$ of Fig. 2.

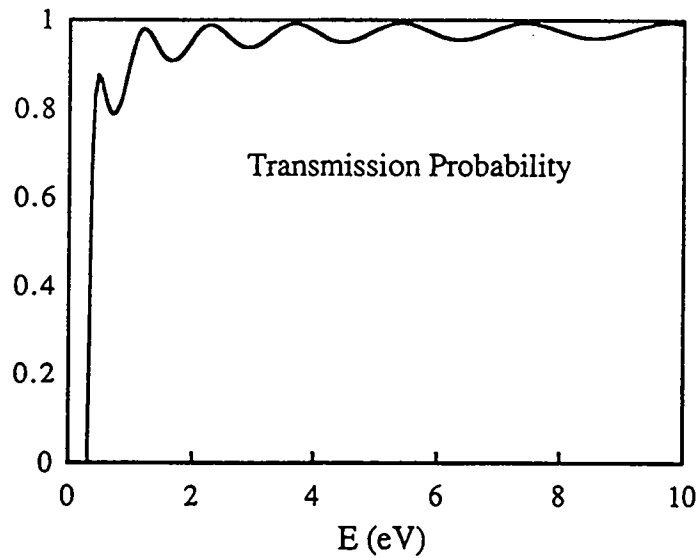


Fig. 2. Transmission probability $|T|^2$, as a function of $E \geq v_- = 0.3$ eV.

For the case $0 \leq E < v_-$, Fig. 3 shows the variation of the phase $\arg R = 2\delta + \pi$ of the transmission amplitude and of its derivative with respect to energy (time-delay), as obtained by solving (4.1). The peak in the derivative of the phase corresponds to a resonance located at 20 meV. Finally, solution of (5.1) gave us the only bound-state of the potential at -0.139 eV.

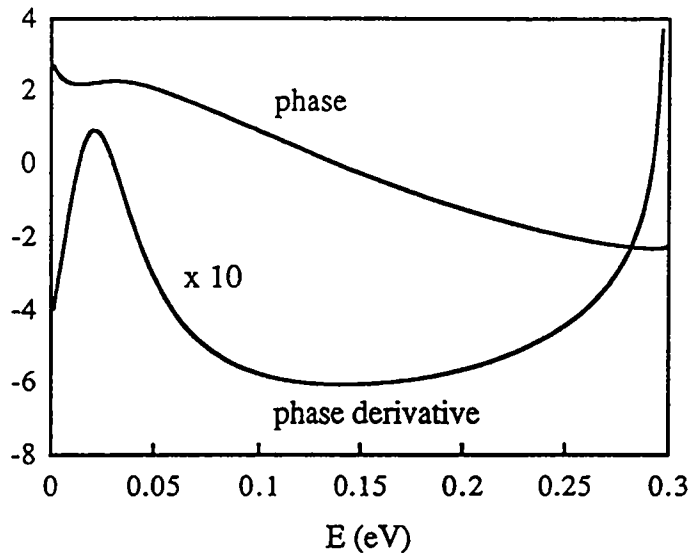


Fig. 3. Phase of the reflection coefficient and its energy-derivative as a function of $0 \leq E < v_- = 0.3$ eV. The phase derivative is here scaled by a factor 10.

8. Conclusion

In this paper we have shown how to derive differential equations for the elements of the scattering matrix, and bound state energies, for the one-dimensional Schrödinger equation with position-dependent mass. These equations were also used to prove a factorization property of the scattering matrix, in the special case where the left and right asymptotic coincide, and their numerical advantages were emphasized in a concrete example. To conclude, we observe in view of (3.1) and (3.8), that once the variable scattering amplitudes are known, the method also allows for the complete determination of scattering and bound-state wave functions.

References

- [1] T. M. Kalotas, A. R. Lee, *Eur. J. Phys.*, **12**, 275 (1991).
- [2] M. O. Vassell, J. Lee, H. F. Lockwood, *J. Appl. Phys.*, **54**, 5206 (1983).
- [3] D.W.L. Sprung, Hua Wu, J. Martorell, *Am. J. Phys.* **61**, 1118 (1993).
- [4] M.G. Rozman, P. Reineker, R. Tehver, *Phys. Rev. A* **49**, 3310 (1994).
- [5] R. G. Newton, *Am. J. Phys.* **62**, 1042 (1994).
- [6] M. Sassoli de Bianchi, M. Di Ventra, *J. Math. Phys.*, **36**, 1753 (1995).
- [7] T. Aktosun: *J. Math. Phys.* **33**, 3865 (1992).
- [8] J.-M. Lévy-Leblond, *Eur. J. Phys.*, **13**, 215 (1992).
- [9] J.-M. Lévy-Leblond, unpublished.
- [10] F. Calogero, “*Variable Phase Approach to Potential Scattering*”, Academic Press, New York and London (1967).
- [11] D. D. Coon, R. P. G. Karunasiri, *Appl. Phys. Lett.*, **45**, 649 (1984).

Troisième partie

Les hamiltoniens dépendant du temps apparaissent de manière naturelle en physique dans la description approchée de systèmes complexes. Il s'agit en général de décrire un petit sous-système dont l'action sur la plus grande partie restante est négligeable. Si la dynamique de la plus grande partie est connue, son action sur le petit sous-système peut alors être approximée par une force qui en général dépendra explicitement du temps. Plus précisément, nous nous intéresserons dans cette troisième partie au problème de la diffusion quantique par un potentiel $V(t)$ qui dépend explicitement du temps, avec une attention particulière pour le cas de la dépendance périodique. Au chapitre IX, nous généralisons le concept de temps de retard. Nous dérivons sa propriété spectrale dans le cas de la dépendance périodique et en déduisons un théorème de Levinson. Dans le chapitre X, nous étudions les régimes adiabatique et haute fréquence, c'est à dire la diffusion par un potentiel qui varie soit très lentement soit très rapidement au cours du temps.

IX. Temps de retard et théorème de Levinson pour des potentiels dépendant du temps

1. Introduction

Nous considérons un système quantique dont l'hamiltonien

$$H(t) = H_0 + V(t), \quad (1.1)$$

agissant sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, est la somme d'une énergie cinétique $H_0 = p^2/2m$ et d'un potentiel $V(t)$ qui dépend explicitement du temps. L'introduction d'une dépendance temporelle explicite dans l'hamiltonien est source d'un certain nombre de complications. En général $[H(t), H(t')] \neq 0$ pour $t \neq t'$ et l'évolution $U(t, t_0)$, solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0), \quad U(t_0, t_0) = I, \quad (1.2)$$

n'est plus donnée en termes d'une exponentielle $e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$, comme pour le cas d'un H statique, mais par sa série de Dyson (du moins quand elle converge)

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \left[I + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0) \right] e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t_0} \quad (1.3)$$

avec

$$U_I^{(n)}(t, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_1) \cdots V_I(t_{n-1}) V_I(t_n) \quad (1.4)$$

et

$$V_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} V(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}. \quad (1.5)$$

Contrairement au cas statique, la dynamique n'est donc plus invariante par translation du temps et l'énergie du système n'est plus conservée. En particulier, il faudra renoncer à une notion d'état stationnaire.

Mais il ne faut pas pour autant renoncer à une théorie de la diffusion. En effet, la caractérisation des états de diffusion relève plutôt de la décroissance spatiale du potentiel que de son éventuelle dépendance explicite dans le temps. Comme les états de diffusion se propagent en dehors de toute région bornée quand $t \rightarrow \pm\infty$, les variations locales du potentiel n'ont pas d'importance si ce dernier s'annule à l'infini. Pour une large classe de potentiels à courte portée, on peut donc faire sens des limites

$$\Omega_{\pm}(\tau) = s\text{-}\lim_{t \rightarrow \pm\infty} U^{\dagger}(t + \tau, \tau) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (1.6)$$

et d'un opérateur de diffusion

$$S(\tau) = \Omega_{+}^{\dagger}(\tau) \Omega_{-}(\tau). \quad (1.7)$$

Ce dernier sera en particulier unitaire si les images des opérateurs d'ondes $\Omega_{+}(\tau)$ et $\Omega_{-}(\tau)$ coïncident (i.e., si la théorie est complète).

Le paramètre $\tau \in \mathbb{R}$ rend ici compte du fait que la dynamique n'est plus invariante par translation du temps [$U(t + \tau, \tau) \neq U(t + \tau', \tau')$ si $\tau \neq \tau'$]. Il peut être compris comme le temps initial de préparation de l'état entrant φ qui est envoyé par $S(\tau)$ sur l'état sortant $S(\tau)\varphi$, toujours défini au temps τ^1 . Il suit immédiatement de (1.6) que les opérateurs d'ondes pour des temps initiaux différents sont reliés par la relation unitaire

$$\Omega_{\pm}(\tau) = U(\tau', \tau) \Omega_{\pm}(\tau') e^{\frac{i}{\hbar} H_0 (\tau - \tau')}, \quad (1.8)$$

ce qui donne pour les opérateurs de diffusion (1.7)

$$S(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 (\tau - \tau')} S(\tau') e^{\frac{i}{\hbar} H_0 (\tau - \tau')}. \quad (1.9)$$

Dans la suite nous poserons $S \equiv S(0)$ et $\Omega_{\pm} \equiv \Omega_{\pm}(0)$.

1.1. Diffusion par un potentiel périodique: l'approche quasi-stationnaire

Si le potentiel est périodique dans le temps $V(t) = V(t + T)$, avec $T = 2\pi/\omega$, on a $U(t + T, T) = U(t, 0)$ et $\Omega(T) = \Omega$. À partir de (1.9) on obtient alors que l'opérateur de diffusion S commute avec l'évolution libre sur une période i.e.,

$$[S, e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 T}] = 0. \quad (1.10)$$

La relation (1.10) a des conséquences physiques intéressantes. Pour le voir, plaçons nous dans le cadre plus simple d'un potentiel $V(t)$ qui est un opérateur de multiplication par une fonction $v(x, t) = v(r, t)$, $r = |x|$, à symétrie sphérique. Dans ce cas, S commute aussi

¹ Nous renvoyons le lecteur à l'article du chapitre X pour une discussion plus détaillée des conséquences physiques du manque d'invariance de la théorie par translation du temps.

avec L^2 et L_z et nous pouvons limiter l'étude de (1.10) à un sous-espace propre $\mathcal{H}_{\ell,m}$ de moment angulaire ℓ et m fixé. Soit $S^\ell = \langle \ell, m | S | \ell, m \rangle$ la restriction de S au sous-espace $\mathcal{H}_{\ell,m}$. La relation de commutation (1.10) nous dit alors que

$$\langle E', \ell, m | [S, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0T}] | E, \ell, m \rangle = \langle E' | S^\ell | E \rangle (e^{-\frac{i}{\hbar}ET} - e^{-\frac{i}{\hbar}E'T}) = 0. \quad (1.11)$$

Le noyau $\langle E' | S^\ell | E \rangle$ sera donc nul sauf si $e^{-\frac{i}{\hbar}ET} = e^{-\frac{i}{\hbar}E'T}$, cette dernière égalité étant vraie seulement si la différence $E' - E$ est un multiple entier de $\hbar\omega$. Écrivons l'énergie $E \in [0, \infty)$ comme la somme $E = \varepsilon + n\hbar\omega$, avec $n \geq 0$ qui est la partie entière de $E/\hbar\omega$ et $\varepsilon \in [0, \hbar\omega)$ la quasi-énergie (i.e., l'énergie modulo $\hbar\omega$). L'égalité (1.11) devient (on écrit $|\varepsilon, n\rangle \equiv |\varepsilon + n\hbar\omega\rangle$)

$$\langle \varepsilon', n' | S^\ell | \varepsilon, n \rangle (e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon'T} - e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon'T}) = 0. \quad (1.12)$$

La parenthèse dans la partie gauche de (1.12) ne peut maintenant s'annuler que si $\varepsilon = \varepsilon'$ et il suit que

$$\langle \varepsilon', n' | S^\ell | \varepsilon, n \rangle = \langle n' | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \delta(\varepsilon - \varepsilon'), \quad (1.13)$$

c'est à dire que la quasi-énergie ε est conservée dans le processus de diffusion².

L'interprétation physique des amplitudes $\langle n' | S_\varepsilon^\ell | n \rangle$ est simple: $|\langle n' | S_\varepsilon^\ell | n \rangle|^2$ est la probabilité pour qu'une onde entrante d'énergie $\varepsilon + n\hbar\omega$ (et de moment angulaire ℓ et m fixé) soit diffusée avec une énergie $\varepsilon + n'\hbar\omega$. Dit autrement, c'est la probabilité d'un transfert de $n' - n$ quanta d'énergie $\hbar\omega$, entre le champ extérieur et la particule, durant le processus de diffusion. Pour une théorie complète on a en plus $S_\varepsilon^\dagger S_\varepsilon = S_\varepsilon S_\varepsilon^\dagger = I$, ce qui implique en particulier

$$\sum_{n'} |\langle n' | S_\varepsilon^\ell | n \rangle|^2 = \sum_n |\langle n' | S_\varepsilon^\ell | n \rangle|^2 = 1. \quad (1.14)$$

Nous voulons maintenant relier les éléments de S_ε^ℓ aux solutions de l'équation de Schrödinger quasi-stationnaire, qui est l'analogie de l'équation de Schrödinger stationnaire pour le cas d'une interaction périodique en temps. Soit $\psi_t = U(t, 0)\Omega_- \varphi$ l'état de diffusion au temps t pour un état initial φ défini au temps $t = 0$. Par définition, il obéit à l'équation de Schrödinger dépendante du temps

$$i\hbar\partial_t\psi_t = [H_0 + V(t)]\psi_t. \quad (1.15)$$

Si le potentiel est périodique, de période $T = 2\pi/\omega$, il admet la décomposition de Fourier

$$V(t) = \sum_n V_n e^{-in\omega t}. \quad (1.16)$$

² Plus précisément, (1.13) signifie que l'opérateur S^ℓ admet une décomposition en intégrale directe $S^\ell = \int^\oplus d\varepsilon S_\varepsilon^\ell$ sur les quasi-énergies $\varepsilon \in [0, \hbar\omega)$, dans la représentation spectrale de $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0T}$.

Par la relation (1.8) on a $\psi_t = \Omega_-(t)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi$, avec $\Omega_-(t)$ qui est aussi périodique de période T . On peut donc écrire

$$\psi_t = \sum_n \Omega_n e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+n\hbar\omega)t}\varphi \quad (1.17)$$

avec les Ω_n qui sont les composantes de Fourier de $\Omega_-(t)$. Insérant (1.16) et (1.17) dans (1.15) on obtient, après comparaison des coefficients $e^{-in\omega t}$,

$$\left(H_0 + \sum_\nu V_{n-\nu} \Omega_\nu\right) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi = \Omega_n(H_0 + n\hbar\omega)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi. \quad (1.18)$$

Formellement, nous pouvons remplacer le vecteur φ dans (1.18) par un pseudo-vecteur propre simultané $|\varepsilon, \rho, \hat{k}\rangle$ de H_0 et \hat{p} (pour les valeurs propres $\varepsilon + \rho\hbar\omega$ et \hat{k}). Suite aux changements de variable $\mu = \rho + n$ et $\sigma = \rho + \nu$, on aboutit à l'équation de Schrödinger quasi-stationnaire

$$H_0 \Omega_{\mu-\rho}|\varepsilon, \rho, \hat{k}\rangle + \sum_\sigma V_{\mu-\sigma} \Omega_{\sigma-\rho}|\varepsilon, \rho, \hat{k}\rangle = (\varepsilon + \mu\hbar\omega) \Omega_{\mu-\rho}|\varepsilon, \rho, \hat{k}\rangle. \quad (1.19)$$

Pour un potentiel à symétrie sphérique on peut choisir au lieu de \hat{p} les observables L^2 et L_z et poser $\hat{k} \equiv \ell, m$ dans (1.19). On a alors la séparation des variables

$$\langle x | \Omega_{\mu\rho} |\varepsilon, \rho, \ell, m\rangle = i^\ell \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2\kappa_\rho}} \frac{1}{r} u_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon, r) Y_\ell^m(\hat{x}), \quad (1.20)$$

avec $\hbar\kappa_\rho = \sqrt{2m(\varepsilon + \rho\hbar\omega)}$. En introduisant (1.20) dans (1.19), on trouve que les fonctions $u_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon, r)$, $\rho \geq 0, \mu \in \mathbb{Z}$, sont les solutions régulières à l'origine de l'équation radiale

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2}\right] u_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon, r) + \sum_\sigma v_{\mu-\sigma}(r) u_{\sigma\rho}^\ell(\varepsilon, r) = (\varepsilon + \mu\hbar\omega) u_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon, r). \quad (1.21)$$

Leur comportement pour $r \rightarrow \infty$ s'obtient à partir des conditions asymptotiques $\psi_t \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi$ pour $t \rightarrow -\infty$ et $\psi_t \rightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}S\varphi$ pour $t \rightarrow \infty$, plus un argument de phase stationnaire [Y1]. On trouve que

$$u_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon, r) = \frac{1}{2i} \left[\mathcal{A}_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon) e^{i(\kappa_\mu r - \frac{\ell\pi}{2})} - \delta_{\mu,\rho} e^{-i(\kappa_\mu r - \frac{\ell\pi}{2})} \right] + o(1) \quad (1.22)$$

pour $r \rightarrow \infty$, avec $\delta_{\mu,\rho}$ le symbole de Kroenecker et $\hbar\kappa_\mu = i\sqrt{2m|\varepsilon + \mu\hbar\omega|}$ pour $\mu < 0$. Les termes avec $\mu < 0$ sont donc exponentiellement décroissants et ne contribuent pas à la limite $r \rightarrow \infty$. On leur donne parfois le nom d'états quasi-liés. D'autre part, pour $\mu \geq 0$, on a la relation [Y1]

$$\mathcal{A}_{\mu\rho}^\ell(\varepsilon) = \sqrt{\frac{\kappa_\rho}{\kappa_\mu}} \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle \quad (1.23)$$

qui établit le lien entre l'approche quasi-stationnaire et celle dépendante du temps.

Nous terminons cette brève introduction en rappelant la relation

$$\langle \mu | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle = \delta_{\mu,\rho} - i^{2\ell+1} \frac{4m}{\sqrt{\kappa_\mu \kappa_\rho}} \int_0^\infty dr u_0^\ell(\varepsilon + \mu \hbar \omega, r) \sum_n v_{\mu-n}(r) u_{n\rho}^\ell(\varepsilon, r) \quad (1.24)$$

qui nous sera utile par la suite (section 4). Elle se dérive aisément en exprimant sur la couche de quasi-énergie ε la représentation intégrale

$$S = I - \frac{i}{\hbar} \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V(t) \Omega_-(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (1.25)$$

pour l'opérateur de diffusion S (voir la section 6). Dans (1.24), $u_0^\ell(\varepsilon + \mu \hbar \omega, r)$ est la solution libre de Riccati-Bessel pour l'énergie $\varepsilon + \mu \hbar \omega$. Pour le cas $\ell = 0$ elle vaut simplement $\sin(\kappa_\mu r)$.

2. Temps de retard pour potentiels dépendant du temps

Dans la première partie de cette thèse nous avons longuement discuté de la définition du temps de retard global pour une diffusion par potentiel statique. Nous allons ici généraliser une telle définition au cas de potentiels dépendant du temps. Pour cela, nous commençons par remarquer que le concept de temps de séjour n'est pas affecté par une dépendance éventuelle de l'interaction dans le temps: si P_r est le projecteur dans la boule spatiale b_r et ψ_t l'état de diffusion au temps t , la valeur moyenne $\mathcal{P}_{\psi_t}(b_r) = \langle \psi_t | P_r \psi_t \rangle$ garde son interprétation de probabilité de présence de la particule dans b_r au temps t , même si le potentiel $V(t)$ varie au cours du temps. Donc, tout comme pour le cas d'un potentiel statique (voir chapitre I), nous pouvons définir le temps de séjour $T_\varphi(b_r)$ de la particule diffusée $\psi_t = U(t, 0) \Omega_- \varphi$ dans b_r , par la moyenne

$$T_\varphi(b_r) = \int dt \mathcal{P}_{\psi_t}(b_r) = \langle \varphi | T(b_r) \varphi \rangle \quad (2.1)$$

avec $T(b_r)$ qui est l'opérateur de temps de séjour

$$\begin{aligned} T(b_r) &= \int dt \Omega_-^\dagger U^\dagger(t, 0) P_r U(t, 0) \Omega_- \\ &= \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \Omega_-^\dagger(t) P_r \Omega_-(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

où pour la dernière égalité nous avons utilisé (1.8).

Pour définir le temps de retard, il faut soustraire à (2.2) un temps de référence libre, puis prendre la limite $r \rightarrow \infty$. Au chapitre I, nous avons choisi comme temps de référence le temps de séjour

$$T_\varphi^0(b_r) = \langle \varphi | T^0(b_r) \varphi \rangle, \quad T^0(b_r) = \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}, \quad (2.3)$$

associé à l'état libre entrant $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}\varphi$, qui coïncide avec ψ_t quand $t \rightarrow -\infty$. Un choix équivalent aurait été le temps de séjour

$$T_{S\varphi}^0(b_r) = \langle \varphi | S^\dagger T^0(b_r) S \varphi \rangle, \quad (2.4)$$

associé à l'état libre sortant $e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t}S\varphi$, qui coïncide avec ψ_t quand $t \rightarrow \infty$. En effet,

$$T_\varphi^0(b_r) = 2r \langle \varphi | \sqrt{\frac{m}{2H_0}} \varphi \rangle + o(1) \quad (2.5)$$

quand $r \rightarrow \infty$, et il suit de la conservation de l'énergie cinétique $[S, H_0] = 0$ que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} [T_\varphi^0(b_r) - T_{S\varphi}^0(b_r)] = 0. \quad (2.6)$$

Mais si le potentiel dépend explicitement du temps, l'énergie cinétique n'est plus conservée par le processus de diffusion, et la limite (2.6) sera en général divergente.

Ces considérations nous amènent à définir le temps de retard global τ_φ pour un potentiel dépendant du temps, par la limite

$$\tau_\varphi = \lim_{r \rightarrow \infty} \tau_\varphi(b_r) \quad (2.7)$$

avec $\tau_\varphi(b_r)$ qui est le temps de retard local

$$\tau_\varphi(b_r) = T_\varphi(b_r) - \frac{1}{2} [T_\varphi^0(b_r) + T_{S\varphi}^0(b_r)], \quad (2.8)$$

défini à l'aide d'un temps de référence libre qui est symétrique par rapport aux états asymptotiques.

2.1. Méthode dépendante du temps

Pour étudier la limite (2.7) nous pouvons procéder comme dans la section I.6. On généralise le lemme de Martin [Ma2] en définissant la quantité

$$\begin{aligned} \sigma_\varphi(b_r) = & \frac{1}{2} \int_0^\infty dt \left[\| P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} S \varphi \|^2 - \| P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \varphi \|^2 \right] \\ & + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 dt \left[\| P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} \varphi \|^2 - \| P_r e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} S \varphi \|^2 \right]. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Un calcul analogue à celui présenté dans la section I.6 montre alors, sous la condition d'intégrabilité des conditions asymptotiques, que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} [\tau_\varphi(b_r) - \sigma_\varphi(b_r)] = 0. \quad (2.10)$$

Pour étudier le comportement asymptotique de $\sigma_\varphi(b_r)$, pour $r \rightarrow \infty$, on écrit

$$\sigma_\varphi(b_r) = \langle \varphi | S^\dagger [T_0(b_r), S] \varphi \rangle \quad (2.11)$$

avec

$$T_0(b_r) = \frac{1}{2} \int_0^\infty dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} P_r e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (2.12)$$

et on utilise les résultats de Amrein et Cibils [AC] pour montrer que

$$T_0(b_r) = T_0 + o(1), \quad (2.13)$$

pour $r \rightarrow \infty$, au sens faible sur le sous-ensemble dense \mathcal{D}_2 de \mathcal{H} (voir I.6). Cela donne pour le temps de retard τ_φ la formule

$$\tau_\varphi = \langle \varphi | S^\dagger [T_0, S] \varphi \rangle, \quad (2.14)$$

formellement analogue à celle déjà dérivée pour le cas d'un potentiel statique, pour autant que l'on puisse montrer que l'opérateur de diffusion laisse bien invariant un certain sous-ensemble dense du domaine de définition de q^2 .

Si le potentiel est périodique dans le temps, nous pouvons expliciter d'avantage la formule (2.14). Pour cela, nous écrivons comme ci-dessus $|\varepsilon, n, \hat{k}\rangle \equiv |\varepsilon + n\hbar\omega, \hat{k}\rangle$ pour les pseudo-vecteurs propres de l'ensemble complet d'observables compatibles $\{H_0, \hat{p}\}$. Les relations de fermeture et orthogonalité s'écrivent alors

$$\sum_{n \geq 0} \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \int_{S^{d-1}} d\hat{k} |\varepsilon, n, \hat{k}\rangle \langle \varepsilon, n, \hat{k}| = I \quad (2.15)$$

et

$$\langle \varepsilon, n, \hat{k} | \varepsilon', n', \hat{k}' \rangle = \delta_{n,n'} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta(\hat{k} - \hat{k}'). \quad (2.16)$$

On notera $\varphi(\varepsilon) = \langle \varepsilon | \varphi \rangle$ les vecteurs dans $L^2(S^{d-1}) \otimes \ell_2(\mathbb{C})$, à quasi-énergie ε fixée, et par

$$\langle \varphi(\varepsilon) | \varphi'(\varepsilon) \rangle_\varepsilon = \sum_{n \geq 0} \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \varphi^*(\varepsilon, n, \hat{k}) \varphi'(\varepsilon, n, \hat{k}), \quad \varphi(\varepsilon, n, \hat{k}) = \langle \varepsilon, n, \hat{k} | \varphi \rangle \quad (2.17)$$

le produit scalaire correspondant. Nous remarquons ensuite que T_0 agit par différentiation dans la représentation spectrale de $e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 T}$, c'est à dire, formellement,

$$\langle \varepsilon | T_0 = -i\hbar \partial_\varepsilon \langle \varepsilon |. \quad (2.18)$$

Il suit que si la matrice de diffusion S_ε est continûment différentiable par rapport à la quasi-énergie, (2.14) devient

$$\begin{aligned} \tau_\varphi &= \langle \varphi | S^\dagger [T_0, S] \varphi \rangle \\ &= -i\hbar \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \left[\langle \varphi(\varepsilon) | S_\varepsilon^\dagger \partial_\varepsilon S_\varepsilon \varphi(\varepsilon) \rangle_\varepsilon - \langle \varphi(\varepsilon) | \partial_\varepsilon \varphi(\varepsilon) \rangle_\varepsilon \right] \\ &= -i\hbar \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \langle \varphi(\varepsilon) | (S_\varepsilon^\dagger \partial_\varepsilon S_\varepsilon) \varphi(\varepsilon) \rangle_\varepsilon, \\ &= \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \langle \varphi(\varepsilon) | \tau_\varepsilon \varphi(\varepsilon) \rangle_\varepsilon, \end{aligned} \quad (2.19)$$

avec

$$\tau_\varepsilon = -i\hbar S_\varepsilon^\dagger \partial_\varepsilon S_\varepsilon \quad (2.20)$$

qui est l'opérateur de Eisenbud-Wigner sur la couche de quasi-énergie ε .

Si en plus le potentiel est à symétrie sphérique, la restriction de τ_ε à un sous-espace propre $\mathcal{H}_{\ell,m}$, de moment angulaire ℓ et m fixé, vaut

$$\tau_\varepsilon^\ell = -i\hbar S_\varepsilon^{\ell\dagger} \partial_\varepsilon S_\varepsilon^\ell, \quad (2.21)$$

et pour un état entrant $\varphi_{\ell,m} \in \mathcal{H}_{\ell,m}$, (2.19) devient

$$\begin{aligned} \tau_{\varphi_{\ell,m}} &= \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \langle \varphi_{\ell,m}(\varepsilon) | \tau_\varepsilon^\ell \varphi_{\ell,m}(\varepsilon) \rangle_\varepsilon \\ &= \sum_{\nu \geq 0} \sum_{\mu \geq 0} \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \varphi_{\ell,m}^*(\varepsilon, \nu) \langle \nu | \tau_\varepsilon^\ell | \mu \rangle \varphi_{\ell,m}(\varepsilon, \mu). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Dans la limite (monochromatique) d'une onde entrante d'énergie $\varepsilon + n\hbar\omega$ i.e., $|\varphi_{\ell,m}(\varepsilon', n')|^2 \rightarrow \delta_{n',n} \delta(\varepsilon' - \varepsilon)$, on obtient $\tau_{\varphi_{\ell,m}} \rightarrow \langle n | \tau_\varepsilon^\ell | n \rangle$. Il en résulte que les éléments diagonaux

$$\begin{aligned} \langle n | \tau_\varepsilon^\ell | n \rangle &= -i\hbar \sum_{\mu \geq 0} \langle n | S_\varepsilon^{\ell\dagger} | \mu \rangle \partial_\varepsilon \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \\ &= -i\hbar \sum_{\mu \geq 0} \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | n \rangle^* \partial_\varepsilon \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \\ &= \sum_{\mu \geq 0} \left| \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \right|^2 \tau_\varepsilon^\ell(\mu, n) \end{aligned} \quad (2.23)$$

de l'opérateur (2.21) s'interprètent comme le temps de retard global pour une onde entrante d'énergie $E = \varepsilon + n\hbar\omega$ et moment cinétique ℓ et m fixés. Dans (2.23) nous avons défini

$$\tau_\varepsilon^\ell(\mu, n) = 2\hbar \partial_\varepsilon \delta_\varepsilon^\ell(\mu, n) \quad (2.24)$$

avec $\delta_\varepsilon^\ell(\mu, n) = \frac{1}{2} \arg \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | n \rangle$. Comme $\left| \langle \mu | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \right|^2$ est la probabilité pour une diffusion avec transfert d'énergie $\varepsilon + n\hbar\omega \rightarrow \varepsilon + \mu\hbar\omega$, le temps de retard global (2.23) est une moyenne pondérée sur les temps de retard conditionnels (2.24).

2.2. Méthode quasi-stationnaire

L'opérateur de temps de séjour commute avec H_0 si l'interaction est indépendante du temps (voir chapitre I). Si le potentiel est périodique dans le temps, il commute avec l'évolution libre sur une période. En effet,

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 T} T(b_r) &= \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 (t-T)} \Omega_-(t)^\dagger P_r \Omega_-(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \\ &= \int dt e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \Omega_-(t+T)^\dagger P_r \Omega_-(t+T) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 (t+T)} \\ &= T^0(b_r) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 T}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

où pour la dernière égalité nous avons utilisé la propriété $\Omega_-(t+T) = \Omega_-(t)$. Il suit de (2.25) que

$$\begin{aligned} T_\varphi(b_r) &= \langle \varphi | T(b_r) \varphi \rangle \\ &= \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \langle \varphi(\varepsilon) | T_\varepsilon(b_r) \varphi(\varepsilon) \rangle_\varepsilon \end{aligned} \quad (2.26)$$

avec $T_\varepsilon(b_r)$ qui est l'opérateur de temps de séjour sur la couche de quasi-énergie ε . Nous allons ici étudier son comportement pour $r \rightarrow \infty$. Pour cela, nous nous limiterons au cas de la symétrie sphérique, c'est à dire aux éléments

$$T_\varepsilon^\ell(b_r) = \langle \ell, m | T_\varepsilon(b_r) | \ell, m \rangle \quad (2.27)$$

à ℓ et m fixés. À l'aide de (2.2) et de la décomposition de Fourier (1.17) pour $\Omega_-(t)$, on obtient

$$\begin{aligned} \langle \mu | T_\varepsilon^\ell(b_r) | \rho \rangle &= 2\pi\hbar \sum_\sigma \langle \varepsilon, \mu, \ell, m | \Omega_{\sigma-\mu}^\dagger P_r \Omega_{\sigma-\rho} | \varepsilon, \rho, \ell, m \rangle \\ &= \frac{4m}{\hbar\sqrt{\kappa_\mu\kappa_\rho}} \sum_\sigma \int_0^r dr' u_{\sigma\mu}^\ell(\varepsilon, r')^* u_{\sigma\rho}^\ell(\varepsilon, r'), \end{aligned} \quad (2.28)$$

où pour la dernière égalité nous avons utilisé (1.20). Les $u_{\sigma\rho}^\ell(\varepsilon, r)$ sont les solutions régulières à l'origine de l'équation de Schrödinger quasi-stationnaire radiale (1.21), avec asymptotique (1.22). Pour déterminer le comportement des éléments (2.28) pour r grand, on utilise l'identité

$$\sum_\sigma u_{\sigma\mu}^\ell(\varepsilon, r)^* u_{\sigma\rho}^\ell(\varepsilon, r) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_\sigma \partial_r \left(\partial_r u_{\sigma\mu}^\ell{}^* \partial_\varepsilon u_{\sigma\rho}^\ell - u_{\sigma\mu}^\ell{}^* \partial_r \partial_\varepsilon u_{\sigma\rho}^\ell \right) (\varepsilon, r) \quad (2.29)$$

qui s'obtient en dérivant (1.21) par rapport à ε . À l'aide de (2.29) on peut alors intégrer (2.28), puis utiliser la forme asymptotique (1.22) et la relation (1.23). Après un long calcul sans difficultés, on obtient (les termes avec $\sigma < 0$ ne contribuent pas dans la limite $r \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} \langle \mu | T_\varepsilon^\ell(b_r) | \rho \rangle &= \langle \mu | \tau_\varepsilon^\ell | \rho \rangle \\ &+ \sum_{\sigma \geq 0} \frac{mr}{\hbar} \left(\langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | \mu \rangle^* \frac{1}{\kappa_\sigma} \langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle + \delta_{\sigma,\mu} \frac{1}{\kappa_\sigma} \delta_{\sigma,\rho} \right) \\ &- \sum_{\sigma \geq 0} \frac{\hbar}{2(\varepsilon + \sigma\hbar\omega)} \frac{1}{2i} \left[\delta_{\sigma,\mu} \langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle e^{i(2\kappa_\sigma r - \ell\pi)} - \delta_{\sigma,\rho} \langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | \mu \rangle^* e^{-i(2\kappa_\sigma r - \ell\pi)} \right] + o(1). \end{aligned} \quad (2.30)$$

D'autre part, pour le temps de référence libre entrant on trouve

$$\langle \mu | T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) | \rho \rangle = \left[\frac{2mr}{\hbar\kappa_\rho} - \frac{\hbar}{2(\varepsilon + \rho\hbar\omega)} \sin(2\kappa_\rho r - \ell\pi) \right] \delta_{\mu,\rho} + o(1), \quad (2.31)$$

et pour le temps de référence libre sortant

$$\langle \mu | S_\varepsilon^{\ell\dagger} T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle = \sum_{\sigma \geq 0} \langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | \mu \rangle^* \left[\frac{2mr}{\hbar\kappa_\sigma} - \frac{\hbar}{2(\varepsilon + \sigma\hbar\omega)} \sin(2\kappa_\sigma r - \ell\pi) \right] \langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle + o(1). \quad (2.32)$$

Les termes linéaires en r se compensent donc dans la différence

$$\begin{aligned} \langle \mu | \tau_\varepsilon^\ell(b_r) | \rho \rangle &= \langle \mu | T_\varepsilon^\ell(b_r) - \frac{1}{2} [T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) + S_\varepsilon^{\ell\dagger} T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) S_\varepsilon^\ell] | \rho \rangle \\ &= \langle \mu | \tau_\varepsilon^\ell | \rho \rangle + \text{termes oscillants} + o(1). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Quant aux termes oscillants, ils ne contribuent pas dans la limite faible (2.7), à cause du Lemme de Riemann-Lebesgue, et on retrouve le résultat (2.22) obtenu par la méthode dépendante du temps.

Remarquons enfin que par la propriété de cyclicité de la trace,

$$\text{Tr } T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) = \text{Tr } S_\varepsilon^{\ell\dagger} T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) S_\varepsilon^\ell, \quad (2.34)$$

et il suit que le temps de retard total $\text{Tr } \tau_\varepsilon^\ell(b_r)$ demeure inchangé si l'on remplace dans sa définition le temps de référence mixte $[T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) + S_\varepsilon^{\ell\dagger} T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) S_\varepsilon^\ell] / 2$ par le temps entrant $T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r)$ ou le temps sortant $S_\varepsilon^{\ell\dagger} T_\varepsilon^{0,\ell}(b_r) S_\varepsilon^\ell$. Plus précisément, pour le cas particulier d'un seul canal entrant n , le temps de retard local pour $r \rightarrow \infty$ se réduit à

$$\begin{aligned} \langle n | \tau_\varepsilon^\ell(b_r) | n \rangle &= \langle n | \tau_\varepsilon^\ell | n \rangle \\ &\quad - \frac{\hbar}{2(\varepsilon + n\hbar\omega)} \left| \langle n | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \right| \sin[2\kappa_n r - \ell\pi + 2\delta_\varepsilon^\ell(n, n)] \\ &\quad - \sum_{\sigma \geq 0} \frac{\hbar}{4(\varepsilon + \sigma\hbar\omega)} \left| \langle \sigma | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \right|^2 \sin(2\kappa_\sigma r - \ell\pi) \\ &\quad - \frac{\hbar}{4(\varepsilon + n\hbar\omega)} \sin(2\kappa_n r - \ell\pi) + o(1), \end{aligned} \quad (2.35)$$

et à l'aide de (1.14), on obtient pour la trace

$$\begin{aligned} \text{Tr } \tau_\varepsilon^\ell(b_r) &= \sum_{n \geq 0} \langle n | \tau_\varepsilon^\ell(b_r) | n \rangle = \text{Tr } \tau_\varepsilon^\ell \\ &\quad - \sum_{n \geq 0} \frac{\hbar}{2(\varepsilon + n\hbar\omega)} \left\{ \left| \langle n | S_\varepsilon^\ell | n \rangle \right| \sin[2\kappa_n r - \ell\pi + 2\delta_\varepsilon^\ell(n, n)] - \sin(2\kappa_n r - \ell\pi) \right\} + o(1). \end{aligned} \quad (2.36)$$

3. Propriété spectrale du temps de retard et théorème de Levinson

Pour un potentiel statique, on peut faire correspondre à la caractérisation "géométrique" des états liés et de diffusion une caractérisation spectrale. Ce résultat, qui est connu dans la littérature sous le nom de théorème de RAGE [Ru],[AG], nous dit grosso modo que le sous-espace \mathcal{H}_s des états de diffusion, qui se propagent en dehors de toute région bornée de l'espace pour $t \rightarrow \pm\infty$, n'est rien d'autre que le sous-espace $\mathcal{H}^{ac}(H)$ associé au spectre absolument continu de l'hamiltonien total H^3 , et que le sous-espace \mathcal{H}_b

³ Pour simplifier la discussion nous supposons que H n'a pas de spectre singulièrement continu.

des états liés, qui restent essentiellement localisés dans une région autour du potentiel, n'est rien d'autre que le sous-espace $\mathcal{H}^{pp}(H)$ associé au spectre purement ponctuel de H (i.e., les valeurs propres). En d'autres termes, la décomposition "géométrique"

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s \oplus \mathcal{H}_b \quad (3.1)$$

de l'espace des états \mathcal{H} est équivalente à la décomposition spectrale

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{ac}(H) \oplus \mathcal{H}^{pp}(H), \quad (3.2)$$

pour l'hamiltonien H , et en particulier la complétude asymptotique de la théorie s'énonce $\text{Image}(\Omega_{\pm}) = \mathcal{H}^{ac}(H)$.

Pour un potentiel périodique dans le temps, grâce à la conservation de la quasi-énergie, on peut encore faire sens d'une caractérisation spectrale des états liés et de diffusion. Cette fois, le rôle de l'hamiltonien est joué par l'opérateur (dit de monodromie) $\mathcal{U} = U(T, 0)$, d'évolution sur une période. Une généralisation du théorème de RAGE [YK],[EV] nous dit alors que (3.1) est équivalente à la décomposition spectrale⁴

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{ac}(\mathcal{U}) \oplus \mathcal{H}^{pp}(\mathcal{U}), \quad (3.3)$$

pour l'opérateur de monodromie \mathcal{U} , et qu'en particulier on a pour la complétude de la théorie $\text{Image}(\Omega_{\pm}) = \mathcal{H}^{ac}(\mathcal{U})$.

D'autre part, pour une condition initiale définie à un temps $\tau \neq 0$, on a, au lieu de (3.1),

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s(\tau) \oplus \mathcal{H}_b(\tau) \quad (3.4)$$

avec $\mathcal{H}_s(\tau)$ qui est l'image des $\Omega_{\pm}(\tau)$. Les projecteurs $\Omega_{\pm}(\tau)\Omega_{\pm}^{\dagger}(\tau)$ sont unitairement équivalents aux projecteurs $\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger}$ [utiliser (1.8)],

$$\Omega_{\pm}(\tau)\Omega_{\pm}^{\dagger}(\tau) = U(\tau, 0)\Omega_{\pm}\Omega_{\pm}^{\dagger}U^{\dagger}(\tau, 0), \quad (3.5)$$

et il suit que $\mathcal{H}_s(\tau)$ est isomorphe à \mathcal{H}_s i.e., $\mathcal{H}_s(\tau) = U(\tau, 0)\mathcal{H}_s$. De plus, comme

$$U(\tau, 0)\mathcal{U}U^{\dagger}(\tau, 0) = U(T + \tau, T)U(T, 0)U^{\dagger}(\tau, 0) = U(T + \tau, \tau), \quad (3.6)$$

on a que (3.4) est aussi équivalente à la décomposition spectrale

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^{ac}[\mathcal{U}(\tau)] \oplus \mathcal{H}^{pp}[\mathcal{U}(\tau)] \quad (3.7)$$

pour $\mathcal{U}(\tau) = U(T + \tau, \tau)$.

⁴ Encore une fois, on suppose par simplicité l'absence de spectre singulièrement continu.

On appelle souvent les états liés $|\xi_j\rangle \in \mathcal{H}^{pp}(\mathcal{U})$, les états cycliques. En effet, en tant que vecteurs propres de \mathcal{U} , ils vérifient l'équation

$$|\xi_j(T)\rangle = U(T, 0)|\xi_j\rangle = \mathcal{U}|\xi_j\rangle = \xi_j|\xi_j\rangle \quad (3.8)$$

avec $|\xi_j| = 1$ (puisque \mathcal{U} est unitaire). Il suit que si $|\xi_j\rangle$ est l'état du système au temps $t = 0$, il n'aura acquis au temps $t = T$ qu'un facteur de phase globale. Le système évolue donc de manière cyclique, dans le sens qu'il revient sur le même rayon de l'espace de Hilbert au bout d'une période. Remarquons que si $|\xi_j\rangle$ est vecteur propre de \mathcal{U} , $|\xi_j(\tau)\rangle = U(\tau, 0)|\xi_j\rangle$ est vecteur propre de $\mathcal{U}(\tau)$, pour la même valeur propre. En effet,

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\tau)|\xi_j(\tau)\rangle &= U(T + \tau, \tau)U(\tau, 0)|\xi_j\rangle \\ &= U(T + \tau, T)U(T, 0)|\xi_j\rangle \\ &= \xi_j U(T + \tau, T)|\xi_j\rangle \\ &= \xi_j U(\tau, 0)|\xi_j\rangle \\ &= \xi_j|\xi_j(\tau)\rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Écrivons les valeurs propres de \mathcal{U} sous la forme $\xi_j = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_j T}$, avec les énergies ε_j qui sont définies dans l'intervalle $[0, \hbar\omega)$, et soient les vecteurs

$$|\varepsilon_j(\tau)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_j \tau} |\xi_j(\tau)\rangle. \quad (3.10)$$

Ils ont la propriété d'être périodiques. En effet,

$$\begin{aligned} |\varepsilon_j(\tau + T)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_j(\tau+T)} |\xi_j(\tau + T)\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_j \tau} e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_j T} \mathcal{U}(\tau)|\xi_j(\tau)\rangle \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\varepsilon_j \tau} |\xi_j(\tau)\rangle = |\varepsilon_j(\tau)\rangle, \end{aligned} \quad (3.11)$$

où pour l'avant dernière égalité nous avons utilisé (3.9). On a donc pour les $|\varepsilon_j(\tau)\rangle$ la décomposition de Fourier

$$|\varepsilon_j(\tau)\rangle = \sum_n |\varepsilon_j, n\rangle e^{-in\omega\tau}. \quad (3.12)$$

En particulier, la condition d'orthonormalisation $\langle \varepsilon_i(\tau) | \varepsilon_j(\tau) \rangle = \delta_{i,j}$ (qui est héritée de celle pour les $|\xi_j(\tau)\rangle$) s'écrit

$$\sum_{n,m} \langle \varepsilon_i, n | \varepsilon_j, m \rangle e^{-i(m-n)\omega\tau} = \delta_{i,j}, \quad (3.13)$$

ou encore, après intégration de (3.13) sur une période,

$$\sum_n \langle \varepsilon_i, n | \varepsilon_j, n \rangle = \delta_{i,j}. \quad (3.14)$$

D'autre part, en dérivant (3.10) par rapport à τ , on découvre que les vecteurs $|\varepsilon_j(\tau)\rangle$ obéissent à l'équation

$$i\hbar\partial_\tau|\varepsilon_j(\tau)\rangle = [H_0 + V(\tau) - \varepsilon_j]|\varepsilon_j(\tau)\rangle \quad (3.15)$$

qui n'est rien d'autre qu'une équation aux valeurs propres pour l'opérateur (dit de quasi-énergie ou de Floquet) $H_0 + V(\tau) - i\hbar\partial_\tau$, restreint à l'espace des fonctions périodiques de τ à valeurs dans \mathcal{H} . Dans la base de Fourier (3.12), elle prend la forme manifestement stationnaire

$$H_0|\varepsilon_j, n\rangle + \sum_\sigma V_{n-\sigma}|\varepsilon_j, \sigma\rangle = (\varepsilon_j + n\hbar\omega)|\varepsilon_j, n\rangle \quad (3.16)$$

avec $V_n = \frac{1}{T} \int_0^T d\tau V(\tau) e^{in\omega\tau}$ les coefficients de Fourier de $V(\tau)$.

Dans le cas particulier d'un potentiel à symétrie sphérique, les solutions de (3.16) sont de la forme $|\varepsilon_j, n, \ell\rangle \otimes |\ell, m\rangle$ avec $|\varepsilon_j, n, \ell\rangle \in \mathcal{H}_{\ell, m}$ (le sous-espace invariant de moment angulaire ℓ et m fixé). En posant $v_n^\ell(\varepsilon_j, r)/r = \langle r|\varepsilon_j, n, \ell\rangle$, (3.16) se transforme dans l'équation radiale

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] v_n^\ell(\varepsilon_j, r) + \sum_\sigma v_{n-\sigma}(r)v_\sigma^\ell(\varepsilon_j, r) = (\varepsilon_j + n\hbar\omega)v_n^\ell(\varepsilon_j, r) \quad (3.17)$$

pour les fonctions $v_n^\ell(\varepsilon_j, r)$, régulières à l'origine, et normalisées selon

$$\sum_n \int_0^\infty dr |v_n^\ell(\varepsilon_j, r)|^2 = 1. \quad (3.18)$$

Après ce bref détour, revenons à la relation de complétude (3.4),(3.7). En termes des projecteurs $\Omega_\pm(\tau)\Omega_\pm^\dagger(\tau)$ et du projecteur

$$P_b(\tau) = \sum_{j=1}^N |\xi_j(\tau)\rangle\langle\xi_j(\tau)| = \sum_{j=1}^N |\varepsilon_j(\tau)\rangle\langle\varepsilon_j(\tau)| \quad (3.19)$$

dans $\mathcal{H}^{pp}[\mathcal{U}(\tau)]$, elle s'écrit

$$\Omega_\pm(\tau)\Omega_\pm^\dagger(\tau) + P_b(\tau) = I, \quad (3.20)$$

ou encore

$$\text{Tr} [\Omega_\pm(\tau), \Omega_\pm^\dagger(\tau)] = -\text{Tr} P_b(\tau) = -N \quad (3.21)$$

avec N qui est le nombre d'états cycliques du système. En raison de la périodicité des $\Omega_\pm(\tau)$, nous pouvons introduire dans (3.21) la décomposition de Fourier (1.17). Cela donne

$$\text{Tr} \sum_{n,m} (\Omega_n \Omega_m^\dagger - \delta_{n,0} \delta_{m,0} I) e^{-i(n-m)\omega\tau} = -N \quad (3.22)$$

ou encore, après intégration sur une période,

$$\mathrm{Tr} \sum_n (\Omega_n \Omega_n^\dagger - \delta_{n,0} I) = -N. \quad (3.23)$$

En procédant comme au chapitre VI, si on écrit la trace dans (3.23) comme la limite de $\int_{b_r} d^d x \langle x | (\cdot) | x \rangle$ pour $r \rightarrow \infty$, et on utilise la relation de fermeture (2.15), on obtient

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \mathrm{Tr} \tau_\varepsilon(b_r) = -2\pi\hbar N \quad (3.24)$$

avec

$$\mathrm{Tr} \tau_\varepsilon(b_r) = \sum_{n \geq 0} \int_{S^{d-1}} d\hat{k} \langle n, \hat{k} | \tau_\varepsilon(b_r) | n, \hat{k} \rangle \quad (3.25)$$

qui n'est rien d'autre que la trace de l'opérateur de temps de retard local

$$\tau_\varepsilon(b_r) = T_\varepsilon(b_r) - \frac{1}{2} [T_\varepsilon^0(b_r) + S_\varepsilon^\dagger T_\varepsilon^0(b_r) S_\varepsilon], \quad (3.26)$$

sur la couche de quasi-énergie ε .

La relation (3.24) exprime la propriété spectrale du temps de retard total pour un potentiel périodique en temps. Tout comme pour son analogue statique (voir chapitre VI) elle est une conséquence directe de la relation de complétude pour les états. Pour un potentiel à symétrie sphérique elle se réduit, bien entendu, à chaque sous-espace de moment angulaire fixé, et devient

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int_0^{\hbar\omega} d\varepsilon \mathrm{Tr} \tau_\varepsilon^\ell(b_r) = -2\pi\hbar N^\ell \quad (3.27)$$

avec $\mathrm{Tr} \tau_\varepsilon^\ell(b_r)$ qui est le temps de retard total (2.36) et N^ℓ le nombre d'états cycliques de moment angulaire ℓ fixé (comptant la multiplicité).

Dans l'article ci-après, nous partons de la propriété (3.27) pour dériver une généralisation du théorème de Levinson. On pourrait s'attendre à un résultat compliqué, en raison du fait que tous les canaux contribuent en principe à la description du processus de diffusion. Nous obtiendrons par contre une réponse étonnamment simple: seule la phase du canal élastique est porteuse de l'information sur le nombre d'états cycliques du système.

4. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *Levinson's theorem for time-periodic potentials*, preprint EPFL, 1995.

Levinson's theorem for time-periodic potentials

Ph. A. Martin and M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. Levinson's theorem is generalized to quantum scattering with time-periodic potentials. The zero-energy limit of the phase shift in the elastic channel is linked to the number of bound (cyclic) states of the time-dependent potential by the same relation as in the static case.

In its usual and simplest formulation, Levinson's theorem states that for a spherically symmetric short-range potential $V(r)$ producing the s -wave phase shift $\delta(E)$ and N_b bound-states of zero angular momentum, one has, with the convention $\delta(\infty) = 0$,

$$\delta(0) = N_b\pi \quad \text{or} \quad \delta(0) = \left(N_b + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (1)$$

where the second case occurs if there is a zero-energy resonance (or half bound-state) [1,2]. In this letter, we give the appropriate generalization of relation (1) to the case where the potential is a short-range time-periodic function $V(r, t)$ of period $T = 2\pi/\omega$,

$$V(r, t) = V(r, t + T) = \sum_n V_n(r) e^{-in\omega t}. \quad (2)$$

The s -wave solutions $u(r, t)$ obey the time-dependent Schrödinger equation (we have set the mass $m = 1/2$ and Plank constant $\hbar = 1$)

$$i\partial_t u(r, t) = \left[-\partial_r^2 + V(r, t)\right] u(r, t) \quad (3)$$

with boundary condition $u(0, t) = 0$, for all t . The time-periodicity $U(t, 0) = U(t + T, T)$ of the corresponding evolution operator implies that energy is conserved in the scattering process only up to an integer number of energy quanta ω . More precisely, we write a positive energy $E = \varepsilon + m\omega$, where $m \geq 0$ is the integer part of E/ω and $0 \leq \varepsilon < \omega$ the conserved quasi-energy. Then, the scattering operator S (here in the sector with zero angular momentum) can be reduced to its quasi-energy shell components $S(\varepsilon)$, with elements $S_{nm}(\varepsilon)$, $n, m \geq 0$, giving the probability amplitudes for scattering with initial energy $\varepsilon + m\omega$ and final energy $\varepsilon + n\omega$. The unitarity $S(\varepsilon)S^\dagger(\varepsilon) = S^\dagger(\varepsilon)S(\varepsilon) = I$ implies

$$\sum_{n \geq 0} |S_{nm}(\varepsilon)|^2 = \sum_{m \geq 0} |S_{nm}(\varepsilon)|^2 = 1 \quad (4)$$

and phase shifts $\delta_{nm}(\varepsilon)$ are defined (mod π) by

$$S_{nm}(\varepsilon) = |S_{nm}(\varepsilon)|e^{2i\delta_{nm}(\varepsilon)}. \quad (5)$$

Energy conserving transitions ($n = m$) are referred to as the elastic channel and we shall write $S_{el}(E) = S_{mm}(\varepsilon)$ for the elastic amplitude with incident energy $E = \varepsilon + m\omega$, and $\delta_{el}(E) = \delta_{mm}(\varepsilon)$ for the corresponding phase shift.

The system may also have cyclic-states $v_j(r, t)$ that are normalized eigenstates of the evolution operator $U(t + T, t)$ over one period (monodromy operator),

$$U(t + T, t)|v_j(t)\rangle = e^{-i\varepsilon_j T}|v_j(t)\rangle, \quad \langle v_i(t)|v_j(t)\rangle = \delta_{i,j}. \quad (6)$$

Then, Levinson's theorem for time-periodic potentials can be stated as follows. Let N_c be the number of cyclic states and $\delta_{el}(0)$ the elastic phase shift at zero energy. With the convention $\delta_{el}(\infty) = 0$, one has the relation

$$\delta_{el}(0) = N_c\pi \quad \text{or} \quad \delta_{el}(0) = \left(N_c + \frac{1}{2}\right)\pi \quad (7)$$

where the second case occurs if the elastic channel is resonant at threshold.

To prove the result (7), it is useful to introduce the quasi-stationary Schrödinger equation by looking for solutions of (2) of the form

$$u(r, t) = \sum_n u_n(\varepsilon, r)e^{-i(\varepsilon+n\omega)t}. \quad (8)$$

Introducing (8) into (3) gives the quasi-stationary equation

$$-\partial_r^2 u_n(\varepsilon, r) + \sum_k V_{n-k}(r)u_k(\varepsilon, r) = (\varepsilon + n\omega)u_n(\varepsilon, r) \quad (9)$$

for the components $u_n(\varepsilon, r)$, with boundary condition $u_n(\varepsilon, 0) = 0$ for all n . Scattering solutions $u_{nm}(\varepsilon, r)$, corresponding to an incoming spherical wave $e^{-i\kappa_m r}$ of energy $\kappa_m^2 = \varepsilon + m\omega$, $m \geq 0$, are specified by the asymptotic behavior

$$u_{nm}(\varepsilon, r) = \frac{1}{2i} \left(\mathcal{A}_{nm}(\varepsilon)e^{i\kappa_n r} - \delta_{n,m}e^{-i\kappa_m r} \right) + o(1) \quad (10)$$

as $r \rightarrow \infty$, with $\kappa_n = \sqrt{\varepsilon + n\omega}$ for $n \geq 0$, $\kappa_n = i\sqrt{|\varepsilon + n\omega|}$ for $n < 0$, and $\delta_{n,m}$ is the Kronecker symbol. The amplitudes $\mathcal{A}_{nm}(\varepsilon)$ are related to the elements of the scattering matrix and to the scattering solutions by [3]

$$\mathcal{A}_{nm}(\varepsilon) = \delta_{n,m} - 2i \sum_l \int_0^\infty dr \frac{\sin \kappa_n r}{\kappa_n} V_{n-l}(r)u_{lm}(\varepsilon, r) = \sqrt{\frac{\kappa_m}{\kappa_n}} S_{nm}(\varepsilon). \quad (11)$$

Since the $u_{lm}(\varepsilon, r)$ are uniformly bounded with respect to ε , we see that for $m \neq 0$, $S_{0m}(\varepsilon) = O(\varepsilon^{1/4})$ as $\varepsilon \rightarrow 0$. Hence, we conclude from the unitarity relation (4) that

$$|S_{0m}(0)| = |S_{m0}(0)| = \delta_{0,m}. \quad (12)$$

It also follows from (11) that, as $m \rightarrow \infty$,

$$S_{mm}(\varepsilon) = 1 + O\left(\frac{1}{\kappa_m}\right) \quad (13)$$

that is, only the elastic channel is open in the low- and high-energy regimes.

The cyclic states, with components $v_n(\varepsilon_j, r)$, are solutions of (9) decaying at $r \rightarrow \infty$, normalized according to

$$\sum_n \int_0^\infty dr |v_n(\varepsilon_j, r)|^2 = 1, \quad j = 1, \dots, N_c. \quad (14)$$

In the static case, it has been noted long ago [4] that Levinson's result may be seen as a consequence of the completeness relation for the set of eigenfunction for the total Hamiltonian. In the time-periodic case, it is also known that for short-range potentials the scattering solutions of the quasi-stationary equation form, together with the cyclic states, a complete set [3,5]. For the s -waves, the completeness relationship reads [6]

$$\frac{1}{\pi} \sum_n \sum_{m \geq 0} \int_0^\omega d\varepsilon \frac{1}{\kappa_m} u_{nm}^*(\varepsilon, r) u_{nm}(\varepsilon, r') + \sum_{j=1}^{N_c} v_n^*(\varepsilon_j, r) v_n(\varepsilon_j, r') = \delta(r - r') \quad (15)$$

and we shall exploit this relation along the same lines as in [7,8]. Subtracting from (15) the corresponding relation for the free solutions $u_{nm}^0(\varepsilon, r) = \delta_{n,m} \sin \kappa_m r$, then integrating from 0 to R and using (14) leads to

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\omega d\varepsilon \tau_R(\varepsilon) = -2\pi N_c \quad (16)$$

where

$$\tau_R(\varepsilon) = \sum_n \sum_{m \geq 0} \frac{2}{\kappa_m} \int_0^R dr \left[|u_{nm}(\varepsilon, r)|^2 - |u_{nm}^0(\varepsilon, r)|^2 \right]. \quad (17)$$

To find the asymptotic behavior of $\tau_R(\varepsilon)$ for $R \rightarrow \infty$, one can use the identity

$$\sum_n |u_{nm}(\varepsilon, r)|^2 = \partial_r \sum_n \left[\partial_r u_{nm}^*(\varepsilon, r) \partial_\varepsilon u_{nm}(\varepsilon, r) - u_{nm}^*(\varepsilon, r) \partial_r \partial_\varepsilon u_{nm}(\varepsilon, r) \right] \quad (18)$$

obtained by deriving the quasi-stationary equation (9) with respect to ε . After a long but straightforward calculation, it yields, using (10) and (11), as $R \rightarrow \infty$,

$$\begin{aligned} \sum_n \frac{2}{\kappa_m} \int_0^R dr |u_{nm}(\varepsilon, r)|^2 = \sum_{n \geq 0} \left\{ -i S_{nm}^*(\varepsilon) \partial_\varepsilon S_{nm}(\varepsilon) + \frac{R}{2\kappa_n} \left[|S_{nm}(\varepsilon)|^2 + \delta_{n,m} \right] \right\} \\ - \frac{|S_{mm}(\varepsilon)|}{2\kappa_m^2} \sin[2\kappa_m R + 2\delta_{mm}(\varepsilon)] + o(1). \end{aligned} \quad (19)$$

Since the contribution of the $u_{nm}(\varepsilon, r)$ with $n < 0$ are exponentially decreasing, the summation in the right hand side of (19) runs only over $n \geq 0$. Subtracting the analogue of (19) for the free solutions [set $S_{nm}(\varepsilon) = \delta_{n,m}$ in (19)], then summing over $m \geq 0$ and using the unitarity (4), the linear terms in R cancel and the final result is

$$\begin{aligned} \tau_R(\varepsilon) &= -i \text{Tr} S^\dagger(\varepsilon) \partial_\varepsilon S(\varepsilon) \\ &\quad - \sum_{m \geq 0} \frac{1}{2\kappa_m^2} \{ |S_{mm}(\varepsilon)| \sin[2\kappa_m R + 2\delta_{mm}(\varepsilon)] - \sin(2\kappa_m R) \} + o(1). \end{aligned} \quad (20)$$

When $\tau_R(\varepsilon)$ is integrated on ε from 0 to ω , the R -dependent terms with $m \neq 0$ vanish as $R \rightarrow \infty$, because of the fast oscillations in the integrand. The terms with $m = 0$ are

$$- \int_0^\omega d\varepsilon [|S_{00}(\varepsilon)| \cos 2\delta_{00}(\varepsilon) - 1] \frac{\sin 2\sqrt{\varepsilon}R}{2\varepsilon} \quad (21)$$

$$- \int_0^\omega d\varepsilon |S_{00}(\varepsilon)| \sin 2\delta_{00}(\varepsilon) \frac{\cos 2\sqrt{\varepsilon}R}{2\varepsilon}. \quad (22)$$

The integrability at $\varepsilon = 0$ of (22) implies, in view of (12), that

$$\sin 2\delta_{00}(0) = 0. \quad (23)$$

Hence, (22) vanishes as $R \rightarrow \infty$. On the other hand, using (12) again, (21) tends to $-\pi[\cos 2\delta_{00}(0) - 1]/2 = \pi \sin^2 \delta_{00}(0)$. We thus find

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^\omega d\varepsilon \tau_R(\varepsilon) = -i \int_0^\omega d\varepsilon \text{Tr} S^\dagger(\varepsilon) \partial_\varepsilon S(\varepsilon) + \pi \sin^2 \delta_{00}(0). \quad (24)$$

The final step consists in using the formula

$$\text{Tr} S^\dagger(\varepsilon) \partial_\varepsilon S(\varepsilon) = \lim_{M \rightarrow \infty} \text{Tr} S_M^{-1}(\varepsilon) \partial_\varepsilon S_M(\varepsilon) = \lim_{M \rightarrow \infty} \partial_\varepsilon \log \det S_M(\varepsilon) \quad (25)$$

where we have defined the truncated matrix $[S_M(\varepsilon)]_{nm} = S_{nm}(\varepsilon)$ for $n, m \leq M$ and $[S_M(\varepsilon)]_{nm} = 0$ otherwise, and its inverse $S_M^{-1}(\varepsilon)$. Integrating (25) gives

$$\begin{aligned} -i \int_0^\omega d\varepsilon \text{Tr} S^\dagger(\varepsilon) \partial_\varepsilon S(\varepsilon) &= -i \lim_{M \rightarrow \infty} \log \frac{\det S_M(\omega)}{\det S_M(0)} \\ &= -2\delta_{00}(0) - i \lim_{M \rightarrow \infty} \log \frac{\det S_M(\omega)}{\det S_{M-1}(\omega)} = -2\delta_{00}(0) - i \lim_{M \rightarrow \infty} \log S_{MM}(\omega). \end{aligned} \quad (26)$$

The second equality in (26) follows from the property $S_{n+1, m+1}(0) = S_{nm}(\omega)$ which holds by the very definition of $S(\varepsilon)$. Thus, by (12), $S(0)$ has a block-diagonal structure and $\det S_M(\omega) = e^{2i\delta_{00}(0)} \det S_{M-1}(\omega)$. For the last equality in (26), we expand $\det S_M(\omega)$ with respect to its last line and use the fact that the off-diagonal elements S_{nM} , $n \neq M$, have to vanish as $M \rightarrow \infty$. Therefore, $\det S_M(\omega) = S_{MM}(\omega) \det S_{M-1}(\omega) + o(1)$ and (26)

follows [9]. Since $S_{MM}(\omega) = |S_{MM}(\omega)| \exp 2i\delta_{MM}(\omega) \rightarrow 1$ because of (13), we can fix the determination of the high energy elastic phase shift by $\delta_{el}(\infty) \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \delta_{MM}(\omega) = 0$. Hence, with this convention, combining (16),(24) and (26), we find that the elastic phase shift $\delta_{el}(0) \equiv \delta_{00}(0)$ at zero energy obeys the relation

$$\delta_{el}(0) = N_c \pi + \frac{\pi}{2} \sin^2 \delta_{el}(0) \quad (27)$$

and the solutions of (27) which are compatible with (23) are precisely those given by (7).

Some final remarks are in order. The same method applies straightforwardly to the sectors with angular momentum $\ell > 0$, as well as to the one-dimensional scattering problem. It is remarkable that in all cases, the number of cyclic states is determined by the phase shift of the sole elastic channel, without the explicit occurrence of quantities pertaining to the inelastic processes. We should however say that, as far as we know, there is no example at the moment of cyclic states in potential scattering. The result of this letter suggests that the formation of such states has to be traced back to certain delicate interference effects in the elastic channel, like the total reflection mechanism put forward in [10].

References

- [1] N. Levinson, Kgl. Danske Videnskab. Selskab. Mat. Fys. Medd. **25**, 9 (1949).
- [2] R. G. Newton, J. Math. Phys. **1**, 319 (1960).
- [3] D. R. Yafaev, "Recent Developments in Quantum Mechanics", edited by A. Boutet de Monvel et al., Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 367 (1991).
- [4] J. M. Jauch: Helv. Phys. Acta **30**, 143 (1957).
- [5] B. K. Yajima, J. Math. Soc. Japan, **29**, 729 (1977).
- [6] Notice that in (15) $\sum_{m \geq 0} \int_0^\omega d\varepsilon = \int_0^\infty dE$ is the sum over all scattering states. The completeness relation (15) can more generally be expressed in terms of the family of incoming wave operators $\Omega_-(t) = \lim_{t_0 \rightarrow -\infty} U(t, t + t_0) e^{-iH_0 t_0}$ in the form

$$\Omega_-(t) \Omega_-^\dagger(t) + \sum_{j=1}^{N_c} |v_j(t)\rangle \langle v_j(t)| = I$$

which holds for each t . Averaging it over one period T and specializing it to the zero angular momentum subspace yields (15).

- [7] N. Poliatzky, Helv. Phys. Acta **66**, 241 (1993).
- [8] M. Sassoli de Bianchi, J. Math. Phys. **35**, 2719 (1994).
- [9] An estimate of the type

$$|S_{nm}(\varepsilon) - \delta_{n,m}| \leq g(n-m) / \sqrt{\kappa_n \kappa_m}$$

where $g(n)$ is rapidly decreasing, enables to control all the steps in these limiting procedures. For instance, for short-range potentials with smooth time-dependence, this estimate follows from the Born series at weak coupling.

- [10] A. K. Kazanskii, V. N. Ostrovskii, E. A. Solov'ev, *Sov. Phys.-JETP*, **43**, 254 (1976).

5. Complément à l'article

Cette section se présente comme un complément à l'article de la section 4. Plus précisément, nous voulons montrer ici comment contrôler les limites (25) et (26) qui nous ont permis d'intégrer la trace du temps de retard et de dériver la généralisation (7) du résultat de Levinson pour des potentiels périodiques en temps. Contrairement aux autres sections en français de cette thèse, nous gardons ici les mêmes notations que celles de l'article ci-dessus.

Nous faisons les hypothèses suivantes: (i) L'opérateur $S^\dagger(\varepsilon)\partial_\varepsilon S(\varepsilon)$ est de classe trace, c'est à dire $\|S^\dagger(\varepsilon)\partial_\varepsilon S(\varepsilon)\|_1 < \infty$, avec en particulier

$$\text{Tr } S^\dagger(\varepsilon)\partial_\varepsilon S(\varepsilon) = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n,m=0}^M S_{nm}^*(\varepsilon)\partial_\varepsilon S_{nm}(\varepsilon) < \infty; \quad (5.1)$$

(ii) le comportement des éléments $S_{nm}(\varepsilon)$ pour n et m grands est majoré par⁵

$$|S_{nm}(\varepsilon) - \delta_{n,m}| \leq \frac{1}{\sqrt{\kappa_n \kappa_m}} g(n-m), \quad (5.2)$$

avec

$$g(n) = O(|n|^{-3/2}). \quad (5.3)$$

Alors, pour $M \rightarrow \infty$, on a

$$\text{Tr } S_M^{-1}(\varepsilon)\partial_\varepsilon S_M(\varepsilon) \rightarrow \text{Tr } S^\dagger(\varepsilon)\partial_\varepsilon S(\varepsilon) \quad (5.4)$$

et

$$\int_0^\omega d\varepsilon \text{Tr } S_M^{-1}(\varepsilon)\partial_\varepsilon S_M(\varepsilon) \rightarrow 2i\delta_{00}(0). \quad (5.5)$$

Nous commençons par examiner le point (5.4). Soient $P_M = \sum_{n=0}^M |n\rangle\langle n|$ et $\bar{P}_M = I - P_M = \sum_{n>M} |n\rangle\langle n|$. On a $S_M(\varepsilon) = P_M S(\varepsilon) P_M$, et l'unitarité $S(\varepsilon)S^\dagger(\varepsilon) = I$ implique (dans la suite on oublie, pour simplifier, l'argument ε)

$$S_M S_M^\dagger + A_M A_M^\dagger = I, \quad (5.6)$$

avec $A_M = P_M S \bar{P}_M$. Multipliant (5.6) à gauche par S_M^{-1} , on obtient

$$S_M^\dagger = S_M^{-1} (I - A_M A_M^\dagger), \quad (5.7)$$

et si $\|A_M A_M^\dagger\| < 1$, on a

$$S_M^{-1} = S_M^\dagger (I - A_M A_M^\dagger)^{-1}. \quad (5.8)$$

⁵ Une estimation de la forme (5.2) peut être obtenue de la série de Born à couplage faible, voir la prochaine section.

Cela donne

$$\begin{aligned}
\text{Tr } S_M^{-1} \partial_\epsilon S_M &= \text{Tr } \partial_\epsilon S_M S_M^{-1} \\
&= \text{Tr} \left[\partial_\epsilon S_M S_M^\dagger (I - A_M A_M^\dagger)^{-1} \right] \\
&= \text{Tr} \left[\partial_\epsilon S_M S_M^\dagger (I - A_M A_M^\dagger + A_M A_M^\dagger) (I - A_M A_M^\dagger)^{-1} \right] \\
&= \text{Tr } S_M^\dagger \partial_\epsilon S_M + \text{Tr} (\partial_\epsilon S_M S_M^\dagger O_M)
\end{aligned} \tag{5.9}$$

avec

$$O_M = A_M A_M^\dagger (I - A_M A_M^\dagger)^{-1}. \tag{5.10}$$

Le premier terme dans (5.9) n'est rien d'autre que l'expression dans la partie droite de (5.1). Elle converge par définition vers $\text{Tr } S^\dagger \partial_\epsilon S$, quand $M \rightarrow \infty$. Pour le deuxième terme, on a

$$\begin{aligned}
\text{Tr} (\partial_\epsilon S_M S_M^\dagger O_M) &= \text{Tr} (P_M \partial_\epsilon S P_M S^\dagger P_M O_M) \\
&= \text{Tr} (P_M S S^\dagger \partial_\epsilon S P_M S^\dagger P_M O_M) \\
&\leq \|O_M\| \|S^\dagger \partial_\epsilon S\|_1,
\end{aligned} \tag{5.11}$$

où pour la dernière inégalité nous avons utilisé le fait que P_M, S et S^\dagger sont tous des opérateurs bornés par 1. Comme par hypothèse $\|S^\dagger \partial_\epsilon S\|_1 < \infty$, il nous reste à montrer que $\|O_M\| \rightarrow 0$ pour $M \rightarrow \infty$ i.e., que $\|A_M A_M^\dagger\| \rightarrow 0$ pour $M \rightarrow \infty$. Or, nous savons que ([Ka] p.144)

$$\|A_M A_M^\dagger\| \leq \sup_{n \geq 0} \alpha_n \tag{5.12}$$

avec

$$\alpha_n = \sum_{m=0} [A_M A_M^\dagger]_{nm} = \sum_{m=0} \sum_{\rho=M+1} S_{n\rho} S_{m\rho}^*. \tag{5.13}$$

Insérant (5.2) dans (5.13), on obtient

$$\begin{aligned}
|\alpha_n| &\leq \frac{1}{\sqrt{\kappa_n}} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{\rho=M+1}^{\infty} \frac{g(n-\rho)g(m-\rho)}{\kappa_\rho \sqrt{\kappa_m}} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{\kappa_n \kappa_{M+1}}} \sum_{\rho=M+1}^{\infty} g(n-\rho) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{g(m-\rho)}{\sqrt{\kappa_m}}.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Par ailleurs,

$$\begin{aligned}
\sum_{m=0}^{\infty} \frac{g(m-\rho)}{\sqrt{\kappa_m}} &= \sum_{j=-\rho}^{\infty} \frac{g(j)}{\sqrt{\kappa_{j+\rho}}} \\
&= \sum_{j=-\rho}^{-\rho/2} \frac{g(j)}{\sqrt{\kappa_{j+\rho}}} + \sum_{j=-\rho/2}^{\infty} \frac{g(j)}{\sqrt{\kappa_{j+\rho}}} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{\kappa_0}} \sum_{j=-\rho}^{-\rho/2} g(j) + \frac{1}{\sqrt{\kappa_{\rho/2}}} \sum_{j=-\rho/2}^{\infty} g(j) \\
&= O(|\rho|^{-1/4}),
\end{aligned} \tag{5.15}$$

où pour la dernière égalité nous avons utilisé (5.3). Donc, (5.14) devient

$$\alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\kappa_n}} O\left(M^{-1/2}\right) \sum_{\rho=M+1}^{\infty} g(n-\rho) O\left(|\rho|^{-1/4}\right). \quad (5.16)$$

Il suit que pour $n > M/2$, on a

$$\begin{aligned} \alpha_n &= O\left(M^{-3/4}\right) \sum_{\rho=M+1}^{\infty} g(n-\rho) O\left(|\rho|^{-1/4}\right) \\ &= O\left(M^{-3/4}\right) O\left(M^{-1/4}\right) \sum_j g(j) = O\left(M^{-1}\right). \end{aligned} \quad (5.17)$$

De même, pour $n \leq M/2$, on a

$$\alpha_n = O\left(M^{-1/2}\right) \sum_{j=-\infty}^{1-M/2} g(j) = O\left(M^{-1}\right), \quad (5.18)$$

où à nouveau pour la dernière égalité nous avons utilisé (5.3). On conclut que $\alpha_n = O(M^{-1})$ pour tout n , et par (5.12) que

$$\|A_M A_M^\dagger\| = O\left(M^{-1}\right), \quad (5.19)$$

ce qui prouve (5.4).

Pour démontrer (5.5), nous partons de la formule (pour la première égalité voir par exemple [Y2], page 43)

$$\begin{aligned} \int_0^\omega d\varepsilon \operatorname{Tr} S_M^{-1}(\varepsilon) \partial_\varepsilon S_M(\varepsilon) &= \int_0^\omega d\varepsilon \partial_\varepsilon \log[\det S_M(\varepsilon)] \\ &= \log \frac{\det S_M(\omega)}{\det S_M(0)} = 2i\delta_{00}(0) + \log \frac{\det S_M(\omega)}{\det S_{M-1}(\omega)}, \end{aligned} \quad (5.20)$$

où, pour la dernière égalité, nous avons utilisé

$$S_M(0) = \begin{pmatrix} e^{2i\delta_{00}(0)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & S_{M-1}(\omega) & \\ 0 & & & \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Le développement du déterminant par rapport à la dernière ligne de $S_M(\omega)$ donne (on oublie dans la suite, pour simplifier, l'argument ω)

$$\begin{aligned} \det S_M &= \sum_{j=0}^M (-1)^{j+M} S_{Mj} \det S_M(M, j) \\ &= S_{MM} \det S_{M-1} + \sum_{j=0}^{M-1} (-1)^{j+M} S_{Mj} \det S_M(N, j), \end{aligned} \quad (5.22)$$

avec $S_M(i, j)$ qui est la matrice obtenue à partir de S_M en supprimant la i -ème ligne et la j -ème colonne. Par l'inégalité de Hadamard⁶ et l'unitarité de S , on a immédiatement que $|\det S_M(N, j)| \leq 1$. Le deuxième terme dans (5.22) est donc majoré par

$$\sum_{j=0}^{M-1} (-1)^{j+M} |S_{Mj}| = O(M^{-1/2}), \quad (5.23)$$

par les mêmes arguments que ci-dessus. De plus, en raison de (5.7),

$$|\det S_M|^2 = \det(S_M S_M^\dagger) = \det(I - A_M A_M^\dagger) = \prod_{i=0}^M (1 - \lambda_i) \quad (5.24)$$

avec les λ_i qui sont les valeurs propres de $A_M A_M^\dagger$. Grâce à (5.19), nous savons que

$$\sup_{0 \leq i \leq M} \lambda_i = \|A_M A_M^\dagger\| \leq \frac{c}{M}, \quad (5.25)$$

et il suit que

$$|\det S_M|^2 \geq \left(1 - \frac{c}{M}\right)^M \rightarrow e^{-c} > 0 \quad (5.26)$$

pour $M \rightarrow \infty$. En conclusion, de (5.23) et (5.26) on obtient

$$\frac{\det S_M}{\det S_{M-1}} = S_{MM} + O(M^{-1/2}), \quad (5.27)$$

et (5.5) suit de $S_{MM} \rightarrow 1$ pour $M \rightarrow \infty$.

Reste bien entendu, pour compléter la preuve, à démontrer que l'opérateur de Eisenbud-Wigner est bien de classe trace. Ce point ne sera pas abordé dans cette thèse. Nous nous bornons ici à remarquer que l'hypothèse est assez naturelle puisque la trace (5.1) apparaît dans la dérivation de la section 4 comme une conséquence plus ou moins directe de l'existence d'une relation de complétude pour les états physiques. D'autre part, pour ce qui est du comportement de la matrice diffusion à haute et basse énergie (5.2), (5.21), il sera étudié dans la prochaine section dans le cas particulier d'un potentiel à faible couplage.

⁶ Si A est une matrice $n \times n$, l'inégalité de Hadamard nous dit que

$$|\det A|^2 \leq \sum_{i=1}^n |A_{i1}|^2 \sum_{i=1}^n |A_{i2}|^2 \cdots \sum_{i=1}^n |A_{in}|^2.$$

6. Série de Born et comportement à haute et basse énergie

Dans cette section nous dérivons la série de Born pour la matrice de diffusion S_ϵ et étudions son comportement à haute et basse énergie. Une manière possible de procéder est d'employer le formalisme homogène de Howland [H], qui permet de reformuler le problème de diffusion par le potentiel dépendant du temps en un problème avec potentiel statique, dans un espace de Hilbert augmenté dans lequel le temps joue un rôle de variable canonique. On peut alors résoudre le problème de perturbation à l'aide des méthodes stationnaires habituelles. Nous allons ici employer une méthode plus directe, qui part directement de la série de Dyson (1.3),(1.4), et dont l'avantage pédagogique est celui de n'utiliser que des quantités dont l'interprétation physique est immédiate.

Pour cela, nous partons de la représentation intégrale (1.25) pour l'opérateur de diffusion⁷. À l'aide des pseudo-vecteurs propres (2.15),(2.16), on obtient pour les éléments $\langle \epsilon', \rho' | S | \epsilon, \rho \rangle$, l'expression (on revient ici à la notation des sections 1 à 3)

$$\langle \epsilon', \rho' | S | \epsilon, \rho \rangle = \delta(\epsilon' - \epsilon) \delta_{\rho', \rho} - \frac{i}{\hbar} \int dt e^{\frac{i}{\hbar}[\epsilon' - \epsilon + (\rho' - \rho)\hbar\omega]t} \langle \epsilon', \rho' | V(t) \Omega_-(t) | \epsilon, \rho \rangle. \quad (6.1)$$

Introduisant les représentations de Fourier (1.16) et (1.17) pour $V(t)$ et $\Omega_-(t)$, on arrive, après une redéfinition des indices de sommation, à la relation

$$\langle \epsilon', \rho' | S | \epsilon, \rho \rangle = \langle \rho' | S_\epsilon | \rho \rangle \delta(\epsilon' - \epsilon) \quad (6.2)$$

avec

$$\langle \rho' | S_\epsilon | \rho \rangle = \delta_{\rho', \rho} I - 2\pi i \sum_m \langle \epsilon, \rho' | V_{\rho' - m} \Omega_{m - \rho} | \epsilon, \rho \rangle. \quad (6.3)$$

Il suffit donc de déterminer la série de perturbation de $\Omega_{m - \rho} | \epsilon, \rho \rangle$ pour obtenir, via (6.3), celle pour les éléments de S_ϵ i.e., la série de Born.

Notre point de départ est la série de Dyson (1.3),(1.4), qui s'écrit, à l'aide de (1.16),

$$U_I(t, t_0) = I + \sum_{n=1}^{\infty} U_I^{(n)}(t, t_0) \quad (6.4)$$

avec

$$U_I^{(n)}(t, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int_{t_0}^t dt_1 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n V_{\sigma_1}(t_1) \cdots V_{\sigma_n}(t_n) e^{-i\omega \sum_{j=1}^n \sigma_j t_j} \quad (6.5)$$

et

$$V_\sigma(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} V_\sigma e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t}. \quad (6.6)$$

⁷ Pour dériver (1.25) il suffit d'utiliser le truc familier qui consiste à écrire $S(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} U(t, t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_0}$ comme l'intégrale de sa dérivée, et à remarquer ensuite que $S = \lim S(t, t_0)$ pour $t \rightarrow \infty$ et $t_0 \rightarrow -\infty$.

Remarquons que

$$\|U_I^{(n)}(t, t_0)\| \leq \frac{1}{n!} \left(\frac{|t - t_0|}{\hbar} \sum_m \|V_m\| \right)^n, \quad (6.7)$$

et que donc (6.4) converge en norme si $|t - t_0| < \infty$ et $\sum_m \|V_m\| < \infty$.

D'autre part, pour l'opérateur $\Omega_-(t)$ nous avons

$$\begin{aligned} \Omega_-(t) &= s\text{-}\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} U^\dagger(t_0 + t, t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t_0} \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left[s\text{-}\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} U_I^\dagger(t, t_0 + t) \right] e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t}. \end{aligned} \quad (6.8)$$

Nous devons donc étudier (6.4) dans la limite $t_0 \rightarrow -\infty$. Pour pouvoir prendre cette limite tout en préservant la convergence de la série, nous introduisons une coupure adiabatique de l'interaction i.e., nous remplaçons $V(t)$ par $e^{\delta t} V(t)$, $\delta > 0$. L'opérateur d'onde $\Omega_-(t, \delta)$, pour le potentiel avec coupure, est alors donné par la série

$$\Omega_-(t, \delta) = I + \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_-^{(n)}(t, \delta), \quad (6.9)$$

avec

$$\begin{aligned} \Omega_-^{(n)}(t, \delta) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \times \\ &\times [V_{\sigma_1}(t_1) \cdots V_{\sigma_n}(t_n)] e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} e^{-i \sum_{j=1}^n (\omega_{\sigma_j} + i\delta) t_j}, \end{aligned} \quad (6.10)$$

qui est bien convergente puisque

$$\|\Omega_-^{(n)}(t, \delta)\| \leq \frac{1}{n!} \left(\frac{e^{\delta t}}{\hbar \delta} \sum_m \|V_m\| \right)^n. \quad (6.11)$$

A la fin du calcul, il faudra bien entendu prendre la limite $\delta \rightarrow 0$, mais la convergence de la série ne sera alors plus garantie car la borne (6.11) explose dans cette limite.

Effectuons dans (6.10) le changement de variables $t_m = \sum_{j=1}^m s_j$, $m = 1, \dots, n$. Cela donne

$$\begin{aligned} \Omega_-^{(n)}(t, \delta) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_n} \int_{-\infty}^t ds_1 \int_{-\infty}^{s_1} ds_2 \cdots \int_{-\infty}^{s_{n-1}} ds_n e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \times \\ &\times \left\{ \prod_{m=1}^n e^{\frac{i}{\hbar} [H_0 - \hbar \sum_{j=m}^n (\omega_{\sigma_j} + i\delta)] s_m} V_{\sigma_m} \right\} e^{\frac{i}{\hbar} H_0 (t - \sum_{j=1}^n s_j)}, \end{aligned} \quad (6.12)$$

c'est à dire une expression qui ne contient plus que des intégrales "désemboîtées". Il devient alors possible d'effectuer les intégrations à l'aide de la formule ($\text{Im } z > 0$)

$$\int_{-\infty}^t ds e^{\frac{i}{\hbar} (H_0 - z) s} = i\hbar R_0(z) e^{\frac{i}{\hbar} (H_0 - z) t}, \quad (6.13)$$

où nous avons défini

$$R_0(z) = (z - H_0)^{-1}. \quad (6.14)$$

Appliquons pour cela, formellement, un pseudo-vecteur propre $|\varepsilon, \rho\rangle$ à (6.12), afin de nous débarrasser de la dernière exponentielle. Utilisant (6.13) puis le changement de variable $\rho_j = \rho + \sum_{m=n-(j-1)}^n \sigma_m$, $j = 1, \dots, n$, on aboutit à

$$\Omega_-^{(n)}(t, \delta)|\varepsilon, \rho\rangle = e^{n\delta t} \sum_{\rho_n} \Omega_{\rho_n-\rho}^{(n)}(\delta)|\varepsilon, \rho\rangle e^{-i(\rho_n-\rho)\omega t} \quad (6.15)$$

avec

$$\Omega_{\rho_n-\rho}^{(n)}(\delta)|\varepsilon, \rho\rangle = \sum_{\rho_1, \dots, \rho_{n-1}} R_0[\varepsilon + \hbar(\rho_n\omega + i\delta)]V_{\rho_n-\rho_{n-1}} \cdots V_{\rho_2-\rho_1} R_0[\varepsilon + \hbar(\rho_1\omega + i\delta)]V_{\rho_1-\rho}|\varepsilon, \rho\rangle. \quad (6.16)$$

Si on fait $\delta \rightarrow 0$ dans (6.15), le facteur $e^{n\delta t} \rightarrow 0$, et on retrouve la série de Fourier de $\Omega_-^{(n)}(t)|\varepsilon, \rho\rangle$. Soit alors

$$G_0(E) \equiv \lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ \delta > 0}} R_0(E + i\delta). \quad (6.17)$$

On a pour $\Omega_{m-\rho}|\varepsilon, \rho\rangle$ la série formelle

$$\Omega_{m-\rho}|\varepsilon, \rho\rangle = \delta_{m,\rho}|\varepsilon, \rho\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_{m-\rho}^{(n)}|\varepsilon, \rho\rangle \quad (6.18)$$

avec

$$\Omega_{m-\rho}^{(n)}|\varepsilon, \rho\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}} G_0(\varepsilon + m\hbar\omega)V_{m-\sigma_1} \cdots V_{\sigma_{n-2}-\sigma_{n-1}} G_0(\varepsilon + \sigma_{n-1}\hbar\omega)V_{\sigma_{n-1}-\rho}|\varepsilon, \rho\rangle. \quad (6.19)$$

Enfin, l'insertion de (6.19) dans (6.3) nous donne la série pour les éléments de S_ε . Plus précisément, on a

$$S_\varepsilon = I - 2\pi i T_\varepsilon, \quad T_\varepsilon = \sum_{n=1}^{\infty} T_\varepsilon^{(n)} \quad (6.20)$$

et

$$\langle \rho' | T_\varepsilon^{(n)} | \rho \rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}} \langle \varepsilon, \rho' | V_{\rho'-\sigma_1} G_0(\varepsilon + \sigma_1\hbar\omega) V_{\sigma_1-\sigma_2} \cdots G_0(\varepsilon + \sigma_{n-1}\hbar\omega) V_{\sigma_{n-1}-\rho} | \varepsilon, \rho \rangle. \quad (6.21)$$

C'est la série de Born généralisée, pour un potentiel périodique en temps. Dans le cas particulier d'une interaction statique $V_{\sigma_j-\sigma_{j+1}} = \delta_{\sigma_j, \sigma_{j+1}} V$ on retrouve, bien entendu, la série de Born habituelle. On peut d'ailleurs donner à (6.21) une forme plus proche de cette dernière en introduisant la notation matricielle

$$V = \sum_{n,m} V_{n-m} |n\rangle \langle m|, \quad (6.22)$$

$$N = \sum_n n |n\rangle \langle n|, \quad (6.23)$$

qui nous permet d'écrire (6.21) sous la forme compacte

$$T_\varepsilon^{(n)} = \langle \varepsilon | V [G_0(\varepsilon + N\hbar\omega)V]^n | \varepsilon \rangle. \quad (6.24)$$

Pour le cas d'un potentiel à symétrie sphérique, on a en particulier pour les éléments

$$\langle \rho' | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle = \langle \rho', \ell, m | S_\varepsilon | \rho, \ell, m \rangle \quad (6.25)$$

le développement

$$\begin{aligned} \langle \rho' | S_\varepsilon^\ell | \rho \rangle &= \delta_{\rho', \rho} - 2\pi i \langle \rho' | T_\varepsilon^\ell | \rho \rangle \\ &= \delta_{\rho', \rho} - 2\pi i \sum_{n=1}^{\infty} \langle \rho' | T_\varepsilon^{\ell(n)} | \rho \rangle \end{aligned} \quad (6.26)$$

avec

$$\begin{aligned} \langle \rho' | T_\varepsilon^{\ell(n)} | \rho \rangle &= \frac{2m}{\pi\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{\kappa_{\rho'}\kappa_\rho}} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}} \int_0^\infty dr_1 \cdots \int_0^\infty dr_n u_0^\ell(\varepsilon + \rho'\hbar\omega, r_1)^* v_{\rho' - \sigma_1}(r_1) \times \\ &\quad \times \langle r_1 | G_0^\ell(\varepsilon + \sigma_1\hbar\omega) | r_2 \rangle \cdots v_{\sigma_{n-1} - \rho}(r_n) u_0^\ell(\varepsilon + \rho\hbar\omega, r_n), \end{aligned} \quad (6.27)$$

qui se déduit de (6.21) à l'aide de

$$\langle x | \varepsilon, \rho, \ell, m \rangle = i^\ell \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2\kappa_\rho}} \frac{1}{r} u_0^\ell(\varepsilon + \rho\hbar\omega, r) Y_\ell^m(\hat{x}). \quad (6.28)$$

6.1. Comportement à haute énergie

Nous nous limitons ici à étudier (6.26), (6.27) pour l'onde $\ell = 0$. On a alors simplement

$$u_0(\varepsilon + \rho\hbar\omega, r) = \sin(\kappa_\rho r) \quad (6.29)$$

et

$$\langle r | G_0(\varepsilon + \rho\hbar\omega) | r' \rangle = -\frac{1}{\kappa_\rho} \begin{cases} \sin(\kappa_\rho r) e^{i\kappa_\rho r'}, & r < r' \\ \sin(\kappa_\rho r') e^{i\kappa_\rho r}, & r > r'. \end{cases} \quad (6.30)$$

Il suit que⁸

$$|\langle r | G_0(\varepsilon + \rho\hbar\omega) | r' \rangle| \leq \min(r, r') \leq \sqrt{rr'}, \quad (6.31)$$

pour tout $\rho \in \mathbb{Z}$. Supposons aussi, pour simplifier, que le potentiel est de la forme

$$v(r, t) = \lambda(t)w(r) = \left(\sum_n \lambda_n e^{-in\omega t} \right) w(r) \quad (6.32)$$

⁸ Cette majoration n'est certainement pas optimale, surtout pour r et r' grands, mais nous ne voulons rien sacrifier ici à la simplicité de l'exposé.

avec $w(r)$ qui est telle que $C = \max(C_0, C_{1/2}, C_1) < \infty$, $C_\beta = \int_0^\infty dr |w(r)| r^\beta$. Il suit que (6.27) est majorée par

$$\begin{aligned} \left| \langle \rho' | T_\varepsilon^{\ell(n)} | \rho \rangle \right| &\leq \frac{2m}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{\kappa_{\rho'} \kappa_\rho}} C^n \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{n-1}} |\lambda_{\rho' - \sigma_1}| \cdots |\lambda_{\sigma_{n-1} - \rho}| \\ &= \frac{2m}{\pi \hbar^2} \frac{1}{\sqrt{\kappa_{\rho'} \kappa_\rho}} \frac{C^n}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha e^{i(\rho' - \rho)\alpha} \tilde{\lambda}^n(\alpha), \end{aligned} \quad (6.33)$$

où pour la dernière égalité nous avons défini la fonction 2π -périodique

$$\tilde{\lambda}(\alpha) = \sum_n |\lambda_n| e^{-in\alpha} = \tilde{\lambda}(-\alpha) \quad (6.34)$$

et utilisé l'identité

$$\frac{1}{2\pi} \sum_n e^{in\alpha} = \sum_n \delta(\alpha - 2\pi n). \quad (6.35)$$

Enfin, introduisant la borne (6.33) dans (6.26), nous obtenons

$$|\langle \rho' | S_\varepsilon | \rho \rangle - \delta_{\rho', \rho}| \leq \frac{1}{\sqrt{\kappa_{\rho'} \kappa_\rho}} g(\rho' - \rho) \quad (6.36)$$

avec $g(n)$ qui est donnée par

$$g(n) = \frac{2m}{\pi \hbar^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \frac{C \tilde{\lambda}(\alpha)}{1 - C \tilde{\lambda}(\alpha)} e^{in\alpha}, \quad (6.37)$$

pour autant que $C|\tilde{\lambda}(\alpha)| < 1$, c'est à dire que le potentiel est à faible couplage. La fonction $g(n)$ va à zéro d'autant plus vite, pour $n \rightarrow \infty$, que $\lambda(t)$ est différentiable. En effet, il suffit pour cela d'intégrer (6.37) par parties et remarquer ensuite que les dérivés de (6.34) font bien sens en raison de la décroissance des coefficients λ_n , elle même conséquence de la différentiabilité de $\lambda(t)$.

6.2. Comportement à basse énergie

Pour contrôler le comportement à basse énergie, on procède comme ci-dessus mais cette fois en majorant le sinus (6.29) non pas par 1 mais par $\kappa_\rho r$. Il faut alors demander une décroissance supplémentaire au potentiel i.e., $C_\beta < \infty$ pour $\beta = 3/2$ et 2. On trouve dans ce cas

$$\langle \rho' | S_\varepsilon | \rho \rangle = \delta_{\rho', \rho} + O\left(\sqrt{\kappa_{\rho'} \kappa_\rho}\right), \quad (6.38)$$

c'est à dire en particulier $\langle 0 | S_0 | 0 \rangle = 1$ (le canal élastique à énergie zéro n'est pas résonnant dans le régime de faible couplage).

X. Théorème adiabatique et théorème “haute fréquence” en théorie quantique de la diffusion

1. Introduction

Dans ce dernier chapitre nous nous intéressons aux régimes adiabatique et de haute fréquence pour la diffusion quantique par un potentiel dépendant du temps. Le régime adiabatique, ou basse fréquence, est celui qui considère l'approximation d'un potentiel qui varie de manière infiniment lente au cours du temps. Une telle approximation est justifiée si, dans un sens à préciser, le mouvement de la particule est rapide comparé aux variations du potentiel. À l'opposé, le régime de haute fréquence considère l'approximation d'un potentiel qui varie de manière infiniment rapide au cours du temps.

Une littérature de taille existe déjà sur l'approximation adiabatique pour des hamiltoniens qui possèdent en tout temps deux projecteurs spectraux isolés. Il n'y a eu cependant que très peu d'études pour ce qui concerne le problème de la diffusion¹. Quant à la limite de haute fréquence, qui est d'intérêt par exemple dans la physique des atomes dans des champs de laser intenses, nous avons remarqué qu'il n'y avait pas encore eu à ce jour de résultats rigoureux.

Nous nous limitons dans cette introduction à une dérivation heuristique de ces deux limites, dans le cadre de l'approche quasi-stationnaire. Elles seront ensuite étudiées de manière plus précise, ainsi que leurs premières corrections, par les méthodes dépendantes du temps que nous développons dans l'article de la deuxième section.

1.1. La limite adiabatique

Considérons la diffusion d'une onde d'énergie E par un potentiel périodique $v(x, \omega t)$, de période $2\pi/\omega$, à une seule dimension d'espace pour simplifier. Au chapitre précédent

¹ Voir les références citées dans l'article ci-après. Rappelons que l'hypothèse de gap dans le spectre n'est pas naturelle en théorie de la diffusion, à cause du spectre absolument continu de l'hamiltonien libre.

nous avons montré que ce problème est gouverné par l'équation de Schrödinger quasi-stationnaire, qui s'écrit dans le cas présent (nous renvoyons le lecteur à ce chapitre pour les notations)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_{\mu\rho}(\varepsilon, x) + \sum_{\sigma} v_{\mu-\sigma}(x) \psi_{\sigma\rho}(\varepsilon, x) = (\varepsilon + \mu\hbar\omega) \psi_{\mu\rho}(\varepsilon, x), \quad (1.1)$$

où nous avons écrit l'énergie incidente $E = \varepsilon + \rho\hbar\omega$. Pour une particule qui vient par exemple de la gauche, on a le comportement asymptotique

$$\psi_{\mu\rho}(\varepsilon, x) = \begin{cases} \delta_{\mu,\rho} e^{i\kappa_{\mu}x} + \mathcal{L}_{\mu\rho}(\varepsilon) e^{-i\kappa_{\mu}x} & x \rightarrow -\infty \\ \mathcal{T}_{\mu\rho}(\varepsilon) e^{i\kappa_{\mu}x} & x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (1.2)$$

et en particulier la probabilité de transmission vaut

$$\mathcal{P}_E = \sum_{\mu \geq 0} \frac{\kappa_{\mu}}{\kappa_{\rho}} |\mathcal{T}_{\mu\rho}(\varepsilon)|^2. \quad (1.3)$$

Nous sommes intéressés par le comportement de la probabilité (1.3) dans la limite $\omega \rightarrow 0$, c'est à dire dans la limite d'une variation infiniment lente du potentiel. Pour cela, il est préférable de travailler dans une base qui fixe de manière explicite l'énergie incidente de la particule. Cela revient à poser

$$\psi_{\mu-\rho}(E, x) = \psi_{\mu\rho}(\varepsilon, x) \quad (1.4)$$

dans (1.1)-(1.3), qui deviennent

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_n(E, x) + \sum_{\sigma} v_{n-\sigma}(x) \psi_{\sigma}(E, x) = (E + n\hbar\omega) \psi_n(E, x), \quad (1.5)$$

$$\psi_n(E, x) = \begin{cases} \delta_{n,0} e^{ik_n x} + \mathcal{L}_n(E) e^{-ik_n x} & x \rightarrow -\infty \\ \mathcal{T}_n(E) e^{ik_n x} & x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (1.6)$$

et

$$\mathcal{P}_E = \sum_{n \geq -[E/\hbar\omega]} \frac{k_n}{k_0} |\mathcal{T}_n(E)|^2, \quad (1.7)$$

avec $\hbar k_n = \sqrt{2m(E + n\hbar\omega)}$, et $[E/\hbar\omega]$ la partie entière de $E/\hbar\omega$. Il suit que dans la limite $\omega \rightarrow 0$, la probabilité (1.7) devient

$$\mathcal{P}_E^0 = \lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{P}_E = \sum_n |\mathcal{T}_n^0(E)|^2 \quad (1.8)$$

avec formellement $\mathcal{T}_n^0(E) = \lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{T}_n(E)$. Pour obtenir les amplitudes limite $\mathcal{T}_n^0(E)$, posons, sans autre forme de procès, $\omega = 0$ dans (1.5). Cela donne

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_n(E, x) + \sum_{\sigma} v_{n-\sigma}(x) \psi_{\sigma}(E, x) = E \psi_n(E, x) \quad (1.9)$$

ce qui n'est rien d'autre que la transformée de Fourier de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + v(x, \alpha) \right] \psi^\alpha(E, x) = E \psi^\alpha(E, x) \quad (1.10)$$

pour les composantes

$$\psi_n(E, x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha \psi^\alpha(E, x) e^{in\alpha}. \quad (1.11)$$

En écrivant T_E^α pour l'amplitude de transmission pour le potentiel statique $v(x, \alpha)$, on obtient alors

$$T_n^0(E) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha T_E^\alpha e^{in\alpha}, \quad (1.12)$$

et il suit de (1.8) que

$$P_E^0 = \sum_n |T_n^0(E)|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha |T_E^\alpha|^2. \quad (1.13)$$

La diffusion par le potentiel dépendant du temps se réduit donc, dans la limite adiabatique, à un problème statique effectif, dans le sens que la probabilité de transmission converge vers la moyenne des probabilités de transmission associées à la famille de potentiels statiques $v(x, \alpha)$.

1.2. La limite "haute fréquence"

Pour dériver la limite de haute fréquence, on peut procéder comme suit. À l'aide de [IX, (6.22),(6.23)], écrivons (1.7) sous la forme matricielle

$$(H_0 + V - N\hbar\omega - E) \psi(E) = 0. \quad (1.14)$$

Introduisons ensuite les projecteurs $P_0 = |0\rangle\langle 0|$ et $\bar{P}_0 = I - P_0 = \sum_{n \neq 0} |n\rangle\langle n|$. Par le sandwich de l'opérateur dans (1.14) avec $P_0 + \bar{P}_0 = I$, utilisant le fait que H_0 commute avec P_0 , \bar{P}_0 et N , et que $P_0 V P_0 = V_0 P_0$, nous obtenons les deux équations couplées

$$(H_0 + V_0 - E) \psi_0(E) + P_0 V \bar{\psi}(E) = 0 \quad (1.15)$$

et

$$(H_0 + \bar{P}_0 V \bar{P}_0 - \hbar\omega \bar{P}_0 N \bar{P}_0 - E) \bar{\psi}(E) + \bar{P}_0 V \psi_0 = 0, \quad (1.16)$$

pour $\psi_0(E) = P_0 \psi(E)$ et $\bar{\psi}(E) = \bar{P}_0 \psi(E)$. La deuxième équation s'inverse formellement pour donner

$$\bar{\psi}(E) = -G(\omega, E) \bar{P}_0 V \psi_0(E) \quad (1.17)$$

avec $G(\omega, E) = (H_0 + \bar{P}_0 V \bar{P}_0 - \hbar\omega \bar{P}_0 N \bar{P}_0 - E)^{-1}$. On obtient ainsi que $\psi_0(E)$ est solution de l'équation

$$(H_0 + V_0 - E) \psi_0(E) + P_0 V G(\omega, E) \bar{P}_0 V \psi_0(E) = 0. \quad (1.18)$$

Dans la limite $\omega \rightarrow \infty$, $G(\omega, E) \rightarrow 0$, et (1.18) se réduit à l'équation de Schrödinger stationnaire

$$(H_0 + V_0 - E)\psi_0(E) = 0 \quad (1.19)$$

pour le potentiel statique V_0 . Il suit en particulier que

$$\mathcal{P}_E^\infty = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \mathcal{P}_E = |T_E(V_0)|^2. \quad (1.20)$$

La diffusion par le potentiel dépendant du temps se réduit donc, dans la limite de haute fréquence, à un problème statique effectif, dans le sens que la probabilité de transmission converge vers la probabilité de transmission pour le potentiel moyenné dans le temps $V_0 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\alpha V(\alpha)$.

2. Article

Nous reproduisons ci-après l'article

Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *On the low- and high-frequency limit of quantum scattering by time-dependent potentials*, J. Phys. A, **28**, 1995, pp. 2403-2427.

On the low and high frequency limit of quantum scattering by time-dependent potentials

Ph. A. Martin and M. Sassoli de Bianchi

Institut de Physique Théorique, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne

CH-1015 Lausanne, Switzerland

Abstract. Using time-dependent methods, we study the scattering of a quantum mechanical particle by short-range potentials with very slow or very fast periodic variations in time. The low and high frequency limits are derived as well as their first non-vanishing corrections, and their physical significance discussed.

1. Introduction

The scattering of a quantum mechanical particle by a time-dependent short-range potential $v(x, t)$ has been the subject of numerous investigations, at a general theoretical level and for specific systems. Typical examples are

- (i) tunneling of a particle through a modulated barrier

$$v(x, t) = w_1(x) + \lambda(t)w_2(x), \quad (1.1)$$

where $w_1(x)$ and $w_2(x)$ are static potentials, and $\lambda(t)$ a time-dependent coupling strength (see for instance [1-6]);

- (ii) scattering by a moving center [5-10]

$$v(x, t) = v(x - a(t)), \quad (1.2)$$

where $a(t)$ is a prescribed classical trajectory. Such time-displaced potentials occur for instance in the study of the a-c Stark effect and in the modeling of chemical reactions at surfaces.

In this paper, we consider time-dependent potentials of the form $v(x, \omega t)$, where ω^{-1} is a very large or very small parameter. We shall mainly be concerned with potentials periodic in time, $v(x, t) = v(x, t + 2\pi)$, so that $\omega \rightarrow 0$ is referred to as the low frequency (or adiabatic) limit and $\omega \rightarrow \infty$ to the high frequency limit. This includes, for instance, the system (1.1) with an oscillating barrier $\lambda(\omega t) = \lambda_0 \cos(\omega t)$, and the system (1.2) with an oscillating center $a(\omega t) = a_0 \cos(\omega t)$.

Although the general formalism is rather well developed (existence of wave operators, unitarity of the scattering operator, see for instance [11-17]), it is notoriously difficult

to perform explicit analytical calculations of scattering probabilities, even in the simplest models. It is therefore of interest to control the limit situations $\omega \rightarrow 0$ and $\omega \rightarrow \infty$, as well as the corresponding asymptotic expansions, and to discuss their physical significance.

The result is that in both cases, for suitably smooth and short range potentials, the scattering by the time-dependent potential reduces to an effective static one. In the low frequency limit, according to the discussion of Section 2, we show that the scattering probabilities converge to the average probabilities associated with the family of time-independent potentials $v(x, \alpha)$, $0 \leq \alpha < 2\pi$. In the high frequency limit, we obtain that the scattering quantities approach those associated with the static average potential $v_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha v(x, \alpha)$.

In Section 2, we discuss general aspects of scattering with time-dependent potentials, and in particular implications of the fact that the dynamics is not invariant under time translations. One point is that particles entering the interaction region at different times do not experience the same configuration of the potential. We are thus led to distinguish two situations, the first one being the more commonly realized:

- (a) the arrival times of the particles in the interaction region have no relation with the characteristic time scale ω^{-1} of the variation of the potential. This happens when there is no control on the times at which the particles in the incident beam are prepared. One has the same effect with a single particle if the energy spreading ΔE of the incoming wave packet is sufficiently narrow to give a time dispersion¹ $\Delta t \simeq \hbar/\Delta E$ larger than ω^{-1} . In all these situations, only averages of scattering probabilities over the time scale ω^{-1} can be observed;
- (b) the incoming beam consists in regular short pulses in phase with the variation of the potential so that all particles feel the same potential when they enter the interaction region.

Section 3 is devoted to the adiabatic limit of the scattering operator. The limit has been studied in [4,11,20,21], and an asymptotic expansion of the S -operator is presented in [21]. Here we state and prove the result up to first order in ω .² At the lowest order, the transition probabilities reduce to those associated with the static potential $v(x, \alpha)$, α fixed, in case (b), or to their average in case (a).

The first order correction in ω can be split into the sum of two terms. The first one involves again only static transition probabilities, but for the potential shifted in time, according to the time of incidence of the incoming particle. It thus makes explicit, at first order in ω , that incoming states prepared at different times (i.e., differing by

¹ We recall that the proper sense of the time-energy uncertainty relation $\Delta E \Delta t \simeq \hbar$, for a free particle, is that one is unable to say when it will cross a given surface with an exactitude greater than $\Delta t \simeq \hbar/\Delta E$; see for instance [19].

² Ref. [22] has appeared during the completion of this work, and the proof of Proposition 1 is similar.

energy-dependent phase factors) see different configurations of the potential. This term contributes non trivially in case (b), but its average vanishes so it does not contribute in case (a). The second term has a more complicated structure: it embodies, at order ω , dynamical effects due to the effective time variation of the potential, and can be expressed in terms of energy derivatives of static quantities. Then, we discuss briefly the first correction to the adiabatic limit of scattering events when a fixed number n of energy quanta $\hbar\omega$ is exchanged with the external field (sidebands) as well as the corresponding energy transfer.

In Section 4, we address the problem of the high frequency limit of the scattering operator. The limit is of interest in the physics of atoms in intense laser fields [7-9] (it has also been investigated numerically in [5]), but we are not aware of a general proof of its existence and of its first non-vanishing correction.

In Section 5 we specialize our results to the case of transmission and reflection probabilities in the one-dimensional scattering problem. In particular, the statistics of quanta will be obtained explicitly in the case of the time displaced potential (1.2). Finally, in Section 6, we present some concluding remarks.

2. The scattering problem for time-dependent potentials: general setting

We are concerned by scattering systems with time-dependent potentials $V(\omega t)$, where $V(\omega t)$ is a multiplication operator by a sufficiently short-ranged function $v(x, \omega t)$ in configuration space \mathbb{R}^d , $d \geq 1$. The total Hamiltonian is

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

where $H_0 = -\Delta/2m$ is the free hamiltonian (m is the mass of the particle and we have set the Planck constant $\hbar = 1$) and ω is a parameter. We denote $U_\omega(t, t_0)$ the corresponding evolution operator with initial condition $U_\omega(t_0, t_0) = I$. It is known that for a large class of potentials $v(x, t)$, that we do not need to specify here (see Section 3), and any real τ , there exist wave operators

$$\Omega_\pm(\omega, \tau) = \text{s-lim}_{t \rightarrow \pm\infty} U_\omega^\dagger(t + \tau, \tau) e^{-iH_0 t} \quad (2.2)$$

and a unitary scattering operator

$$S(\omega, \tau) = \Omega_+^\dagger(\omega, \tau) \Omega_-(\omega, \tau). \quad (2.3)$$

The wave operators $\Omega_\pm(\omega) \equiv \Omega_\pm(\omega, 0)$ and $\Omega_\pm(\omega, \tau)$ are related by the generalized intertwining property

$$\Omega_\pm(\omega, \tau) = U_\omega(\tau, 0) \Omega_\pm(\omega) e^{iH_0 \tau}, \quad (2.4)$$

which in turn yields for the scattering operators $S(\omega) \equiv S(\omega, 0)$ and $S(\omega, \tau)$ the relation

$$S(\omega, \tau) = e^{-iH_0\tau} S(\omega) e^{iH_0\tau}. \quad (2.5)$$

Let F be an arbitrary projection operator in $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^d)$, commuting with H_0 . We are interested in the quantity

$$\mathcal{P}_F(\omega, \tau, \varphi) = \|FS(\omega, \tau)\varphi\|_2^2 = \|FS(\omega)e^{iH_0\tau}\varphi\|_2^2, \quad (2.6)$$

which is the probability to find asymptotically the scattering state in the subspace $F\mathcal{H}$, for an incoming wave packet $e^{iH_0\tau}\varphi$. Clearly, φ and $e^{iH_0\tau}\varphi$ represent two identically prepared states, except for a time lag τ . Since the interaction is not invariant under time-translations, all possible scattering events are not described by a single scattering operator, but by the whole family $S(\omega, \tau)$, $\tau \in \mathbb{R}$.

In the discussion hereabove, the origin of time was conventionally fixed such that the potential has amplitude $v(x, 0)$ at $t = 0$. It could as well be chosen such that the potential equals $v(x, \alpha)$ at $t = 0$, for some $\alpha \neq 0$. In this case, we replace (2.1) by

$$H(\omega t + \alpha) = H_0 + V(\omega t + \alpha), \quad (2.7)$$

with corresponding evolution $U_\omega^\alpha(t, t_0)$, wave operators $\Omega_\pm^\alpha(\omega, \tau)$ and scattering operator $S^\alpha(\omega, \tau)$. Now, we have the equality

$$U_\omega^{\omega\tau}(t, t_0) = U_\omega(t + \tau, t_0 + \tau), \quad (2.8)$$

since both evolution operators in (2.8) obey the same differential equation with the same initial condition at $t = t_0$. Setting $S^\alpha(\omega) \equiv S^\alpha(\omega, 0)$, this implies, in view of the definitions (2.2), (2.3), that

$$S(\omega, \tau) = S^{\omega\tau}(\omega). \quad (2.9)$$

Combining (2.5) with (2.9) yields

$$S^\alpha(\omega) = e^{-iH_0\frac{\alpha}{\omega}} S(\omega) e^{iH_0\frac{\alpha}{\omega}} \quad (2.10)$$

or, in differential form,

$$i\omega\partial_\alpha S^\alpha(\omega) = [H_0, S^\alpha(\omega)]. \quad (2.11)$$

Equations (2.9) or (2.10) may be seen as a precise version of the simple statement saying that two incoming packets with a time lag τ will feel the external potential with the time difference τ . Let us restrict our attention to potentials periodic in time $V(t) = V(t + 2\pi)$, so that $V(\omega t)$ has period $2\pi/\omega$. This implies immediately, by (2.10),

$$S^\alpha(\omega) = S^{\alpha+2\pi}(\omega) = e^{-iH_0\frac{2\pi}{\omega}} S^\alpha(\omega) e^{iH_0\frac{2\pi}{\omega}} \quad (2.12)$$

i.e., the scattering operator commutes with the free evolution over one period. The commutation relation (2.12) is the precise law of quasi-energy conservation saying that, while H_0 may not be conserved by scattering, the energy can be changed only by discrete quanta $n\omega$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ [14, 18]. In view of the periodicity $S^\alpha(\omega) = S^{\alpha+2\pi}(\omega)$, we can introduce the Fourier decomposition of the scattering operator

$$S^\alpha(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} S^n(\omega) e^{-in\alpha} \quad (2.13)$$

with

$$S^n(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha S^\alpha(\omega) e^{in\alpha}. \quad (2.14)$$

The coefficients $S^n(\omega)$, $n \neq 0$, are called the ‘‘sideband’’ contributions to the total scattering operator. The relation (2.11) implies obviously

$$n\omega S^n(\omega) = [H_0, S^n(\omega)]. \quad (2.15)$$

Thus, every sideband $S^n(\omega)$, $n \neq 0$, describes scattering events with an energy shift equal to $n\omega$, or, in other words, with emission ($n > 0$) or absorption ($n < 0$) of exactly n quanta of energy ω . The probabilities of such events are

$$\mathcal{P}_F^n(\omega, \varphi) = \|FS^n(\omega)\varphi\|_2^2. \quad (2.16)$$

In particular, for $F = I$,

$$\mathcal{P}^n(\omega, \varphi) = \|S^n(\omega)\varphi\|_2^2 \quad (2.17)$$

is the probability of emitting ($n > 0$) or absorbing ($n < 0$) n quanta during the scattering process.

The scattering probabilities that are relevant to the situations (a) and (b) described in the introduction are

$$\mathcal{P}_F^\alpha(\omega, \varphi) = \|FS^\alpha(\omega)\varphi\|_2^2 = \sum_{n,m=-\infty}^{\infty} (\varphi, S^{n\dagger}(\omega)FS^m(\omega)\varphi) e^{i(n-m)\alpha}, \quad (2.18)$$

if the scattering is sensitive to the precise time at which the interaction occurs (case (b)), and by the corresponding average

$$\bar{\mathcal{P}}_F(\omega, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \mathcal{P}_F^\alpha(\omega, \varphi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{P}_F^n(\omega, \varphi) \quad (2.19)$$

in the other situations (case (a)). Formula (2.19) applies for instance if the initial beam is constituted of a succession of incoming wave packets with a small time lag $d\tau$, that are

scattered independently, and the counters integrate all events during the period $2\pi/\omega$. Then, the observed probability will indeed be

$$\frac{\omega}{2\pi} \int_{-\pi/\omega}^{\pi/\omega} d\tau \mathcal{P}_F(\omega, \tau, \varphi) = \overline{\mathcal{P}}_F(\omega, \varphi) \quad (2.20)$$

where the equality follows from (2.9) and (2.10). It applies also if the incoming state $\varphi(E)$, as a function of energy E , has support in an interval $\Delta E < \omega$, since then, as a consequence of (2.15), the off-diagonal contributions $(\varphi, S^{n\dagger}(\omega)FS^m(\omega)\varphi)$ vanish for $n \neq m$. Thus, for a small spreading in energy, i.e., for an uncertainty in time larger than $2\pi/\omega$, (2.18) reduces also to (2.19).

Notice that since the asymptotic observable $F^\alpha(\omega) = S^{\alpha\dagger}(\omega)FS^\alpha(\omega)$ also obeys (2.11) i.e.,

$$i\omega \partial_\alpha F^\alpha(\omega) = [H_0, F^\alpha(\omega)], \quad (2.21)$$

the average $\overline{F}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha F^\alpha(\omega)$, as well as the sideband contributions $F^n(\omega) = S^{n\dagger}(\omega)FS^n(\omega)$ commute with the kinetic energy H_0 . Thus, case (a) involves only the on the energy shell part of these observables, whereas in the situation (b), the probabilities (2.18) depend in particular on the phase of the incident wave packet and cannot simply be reduced to on-shell calculations.

Finally, let us consider the total energy variation of the particle during the scattering process

$$\Delta^\alpha(\omega) = H_0^\alpha(\omega) - H_0, \quad (2.22)$$

where $H_0^\alpha(\omega) = S^{\alpha\dagger}(\omega)H_0S^\alpha(\omega)$ is the asymptotic outgoing energy. According to (2.11), this quantity is related to the scattering operator by

$$\Delta^\alpha(\omega) = i\omega S^{\alpha\dagger}(\omega)\partial_\alpha S^\alpha(\omega). \quad (2.23)$$

Introducing the sidebands (2.13) in the right hand side of (2.23) and averaging over α gives the quasi-energy conservation law for an incoming state φ

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n\omega \mathcal{P}^n(\omega, \varphi) = (\varphi, \overline{\Delta}(\omega)\varphi), \quad (2.24)$$

where the $\mathcal{P}^n(\omega, \varphi)$ are defined in (2.17). Equation (2.24) is an energy balance: the loss or gain in energy of the scattered particles equals the average energy emitted or absorbed from the external field.

3. The low frequency limit

3.1. The adiabatic theorem

Throughout the paper, we assume that the potential satisfies the bound

$$|v(x, t)| \leq b \langle x \rangle^{-\eta}, \quad \eta > 1, \quad (3.1)$$

where b is a constant independent of t and we have introduced the notation $\langle x \rangle = (1 + |x|^2)^{1/2}$. Note that an equivalent formulation of (3.1) is to require that $\langle q \rangle^\eta V(t)$ is bounded uniformly with respect to t , where $q = (q_1, \dots, q_d)$ is the multiplication operator by $x = (x_1, \dots, x_d)$.

Then, one knows that the wave operators $\Omega_\pm^\alpha(\omega)$ associated with the hamiltonian (2.7) exist as strong limits. In the periodic case, it is shown in [12] that they are complete,³ and the scattering operator $S^\alpha(\omega)$ is unitary. Unitarity of the wave operators has also been proven for repulsive potentials, not necessarily time-periodic [15], and for potentials switched on and off in time [11]. We quote also the results of [16] for the case of moving potentials, and of [17] for Hamiltonians asymptotically constant in time.

For the adiabatic as well as for the high frequency limit (Section 4), our proofs rely on the fact that, for suitably smooth incoming states, scattering states leave sufficiently fast a localized region in configuration space. This is expressed in the following

Lemma. *Consider the scattering system (H, H_0) , $H = H_0 + V$, where V is the multiplication by a static potential $v(x)$ such that both $v(x)$ and $x \cdot \nabla v(x)$ satisfy (3.1). Let Ω_\pm be the corresponding wave operators and \mathcal{D} the dense subset of \mathcal{H} of vectors $\varphi(x)$ such that their Fourier transform $\tilde{\varphi}(k)$ are infinitely differentiable functions of k with compact support and no support at the origin. Then, for any $\varphi \in \mathcal{D}$ and $\varepsilon > 0$, there exists a constant c , independent of t , such that*

$$\| \langle q \rangle^{-\eta} e^{-iHt} \Omega_- \varphi \|_2 \leq c (1 + |t|)^{\varepsilon - \eta}. \quad (3.2)$$

The same estimate holds for Ω_- replaced by Ω_+ .

The Lemma is an immediate consequence of Proposition 2 of Ref. [23].⁴ It asserts that the scattering state $e^{-iHt} \Omega_- \varphi$ propagates away sufficiently fast as $t \rightarrow \pm\infty$, provided that the incoming state is smooth and has non vanishing kinetic energy, and η is large enough.

³ Complete means that the ranges $R(\Omega_+^\alpha(\omega)) = R(\Omega_-^\alpha(\omega)) =$ absolutely continuous subspace of the monodromy operator $U_\omega^\alpha(2\pi/\omega, 0)$.

⁴ Since $\tilde{\varphi}(k)$ is assumed to be infinitely differentiable, φ is in the domain of $|q|^\rho$, for all $\rho > 1$, and we have set the function $\phi(H)$ occurring in Eq. (30) of Ref [23] equal to 1 on the support of $\tilde{\varphi}$, by intertwining.

The above mentioned results hold for a wider class of potentials allowing also for local singularities (see [12],[22]). To avoid technical development, we deal here only with bounded potentials.

To formulate the adiabatic limit, we introduce the scattering system $(H(\alpha), H_0)$, $H(\alpha) = H_0 + V(\alpha)$, determined by the static interaction $V(\alpha)$, α fixed, with corresponding wave operators Ω_{\pm}^{α} and scattering operator $S^{\alpha} = \Omega_{+}^{\alpha \dagger} \Omega_{-}^{\alpha}$. Then, we expect that $S^{\alpha}(\omega)$ approaches S^{α} as $\omega \rightarrow 0$. More precisely, we have the following

Proposition 1.

(i) If $V(t)$ satisfy (3.1) with $\eta > 1$ and is norm continuous with respect to t , then

$$\text{s-}\lim_{\omega \rightarrow 0} S^{\alpha}(\omega) = S^{\alpha}. \quad (3.3)$$

(ii) If in addition $V(t)$ is continuously differentiable in norm with respect to t , $v(x, t)$, $x \cdot \nabla v(x, t)$ and $\partial_t v(x, t)$ satisfy (3.1) with $\eta > 2$, then, for $\varphi \in \mathcal{D}$,

$$S^{\alpha}(\omega)\varphi = S^{\alpha}\varphi + \omega S_1^{\alpha}\varphi + \omega g^{\alpha}(\omega) \quad (3.4)$$

where

$$S_1^{\alpha}\varphi = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt t e^{iH_0 t} \Omega_{+}^{\alpha \dagger} V'(\alpha) \Omega_{-}^{\alpha} e^{-iH_0 t} \varphi, \quad (3.5)$$

and $V'(\alpha) = \partial_{\alpha} V(\alpha)$. The vector $g^{\alpha}(\omega)$ has a uniformly bounded norm and converges weakly to zero as $\omega \rightarrow 0$.

Proof. (i) We set

$$\Omega_{\pm}^{\alpha} = e^{iH(\alpha)t} e^{-iH_0 t}, \quad \Omega_{\pm}^{\alpha}(\omega) = U_{\omega}^{\alpha \dagger}(t, 0) e^{-iH_0 t}. \quad (3.6)$$

Then,

$$\begin{aligned} \|(\Omega_{+}^{\alpha}(\omega) - \Omega_{+}^{\alpha})\varphi\|_2 &\leq \|(\Omega_{+}^{\alpha}(\omega) - \Omega_{\pm}^{\alpha}(\omega))\varphi\|_2 + \|(\Omega_{+}^{\alpha} - \Omega_{\pm}^{\alpha})\varphi\|_2 + \\ &+ \|(\Omega_{\pm}^{\alpha}(\omega) - \Omega_{\pm}^{\alpha})\varphi\|_2. \end{aligned} \quad (3.7)$$

We have the standard estimate for $\varphi \in \mathcal{D}$,

$$\begin{aligned} \|(\Omega_{+}^{\alpha}(\omega) - \Omega_{\pm}^{\alpha})\varphi\|_2 &\leq \int_t^{\infty} ds \|V(\alpha + \omega s) e^{-iH_0 s} \varphi\|_2 \\ &\leq \sup_s \|V(\alpha + \omega s)\langle q \rangle^{\eta}\| \int_t^{\infty} ds \|\langle q \rangle^{-\eta} e^{-iH_0 s} \varphi\|_2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Using (3.1) and applying (3.2) in the free case with $\eta > 1$ and ε sufficiently small, we see that (3.8) tends to zero as $t \rightarrow \infty$, uniformly with respect to ω . The same is obviously true for the second term in the r.h.s. of (3.7). To estimate the last term in (3.7) we write

$$\Omega_{\pm}^{\alpha}(\omega) = U_{\omega}^{\alpha \dagger}(t, 0) e^{-iH(\alpha)t} \Omega_{\pm}^{\alpha} = \Omega_{\pm}^{\alpha} - i \int_0^t ds U_{\omega}^{\alpha \dagger}(s, 0) (V(\omega s + \alpha) - V(\alpha)) e^{-iH(\alpha)s} \Omega_{\pm}^{\alpha}, \quad (3.9)$$

leading to

$$\| (\Omega_t^\alpha(\omega) - \Omega_t^\alpha) \varphi \|_2 \leq \int_0^t ds \| V(\omega s + \alpha) - V(\alpha) \|, \quad (3.10)$$

which tends to zero as $\omega \rightarrow 0$, for any fixed t , because of the norm-continuity of $V(t)$. Thus, letting first $\omega \rightarrow 0$, and then $t \rightarrow \infty$ in (3.7), we have shown that $\lim_{\omega \rightarrow 0} \Omega_+^\alpha(\omega) \varphi = \Omega_+^\alpha \varphi$ for any $\varphi \in \mathcal{D}$, and the same proof clearly holds for $\Omega_-^\alpha(\omega)$. Since the $\Omega_\pm^\alpha(\omega)$ are uniformly bounded with respect to ω , the result is true for all $\varphi \in \mathcal{H}$, implying that $S^\alpha(\omega)$ converges weakly to S^α as $\omega \rightarrow 0$. But, since the $S^\alpha(\omega)$ are isometric, $S^\alpha(\omega) \rightarrow S^\alpha$ strongly.

(ii) Consider the scattering system defined by the pair $(H(\omega t + \alpha), H(\alpha))$. It is easy to see that the corresponding wave operators $\tilde{\Omega}_\pm^\alpha(\omega)$ exist on the range $R(\Omega_-^\alpha) = R(\Omega_+^\alpha)$. For this, it suffices to note, following the estimate (3.8), that for $\varphi \in \mathcal{D}$,

$$\begin{aligned} \| (V(\omega t + \alpha) - V(\alpha)) e^{-iH(\alpha)t} \Omega_-^\alpha \varphi \|_2 &\leq (\| V(\omega t + \alpha) \langle q \rangle^\eta \| + \| V(\alpha) \langle q \rangle^\eta \|) \times \\ &\times \| \langle q \rangle^{-\eta} e^{-iH(\alpha)t} \Omega_-^\alpha \varphi \|_2 \leq 2bc(1 + |t|)^{\varepsilon - \eta}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

which is integrable for ε sufficiently small. This enables to represent the full scattering operator $S^\alpha(\omega)$ by, the chain rule [15], as

$$S^\alpha(\omega) = \Omega_+^{\alpha\dagger} \tilde{S}^\alpha(\omega) \Omega_-^\alpha, \quad (3.12)$$

where Ω_\pm^α are the wave operators belonging to $(H(\alpha), H_0)$ and $\tilde{S}^\alpha(\omega) = \tilde{\Omega}_+^{\alpha\dagger}(\omega) \tilde{\Omega}_-^\alpha(\omega)$ is the scattering operator of the system $(H(\omega t + \alpha), H(\alpha))$, defined on $R(\Omega_-^\alpha)$. Let $\psi = \Omega_-^\alpha \varphi$, $\varphi \in \mathcal{D}$. One can represent $\tilde{S}^\alpha(\omega) \psi$ as a weak limit in $R(\Omega_-^\alpha)$ by

$$(\chi, \tilde{S}^\alpha(\omega) \psi) = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} (\chi, \tilde{S}^\alpha(\omega; t, t_0) \psi), \quad \chi \in R(\Omega_-^\alpha), \quad (3.13)$$

with

$$\begin{aligned} \tilde{S}^\alpha(\omega; t, t_0) &= e^{iH(\alpha)t} U_\omega^\alpha(t, t_0) e^{-iH(\alpha)t_0} \\ &= I - ie^{iH(\alpha)t} U_\omega^\alpha(t, 0) \int_{t_0}^t ds U_\omega^{\alpha\dagger}(s, 0) (V(\omega s + \alpha) - V(\alpha)) e^{-iH(\alpha)s}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

It is clear that the formal limit $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow \infty$ and $\omega \rightarrow 0$ of the second term of (3.14), when inserted in (3.12), gives the expression (3.5) of the first order correction. The relevant estimates to prove (3.4) are as follows. From (3.14), we have (omitting from now on the index and argument α)

$$\| (\tilde{S}(\omega; t, t_0) - I) \psi \|_2 \leq \int_{-\infty}^\infty ds \| (V(\omega s) - V) e^{-iHs} \psi \|_2. \quad (3.15)$$

As seen in (3.11), the integrand in (3.15) is majorized uniformly in ω by an integrable function of s , and it tends pointwise to zero by the continuity of $V(t)$. Thus, dominated convergence implies

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \sup_{t, t_0} \| (\tilde{S}(\omega; t, t_0) - I) \psi \|_2 = 0, \quad (3.16)$$

and in view of the unitarity of $\tilde{S}(\omega; t, t_0)$, the limit (3.16) can be extended to all $\psi \in \mathbf{R}(\Omega_-)$. Then, we write the equality (3.14) in the form

$$\begin{aligned} (\chi, \tilde{S}(\omega; t, t_0)\psi) &= (\chi, \psi) - i\omega \int_{t_0}^t ds s (\chi, e^{iHs} V' e^{-iHs} \psi) \\ &\quad + \omega (\chi, g_1(\omega; t, t_0)) + \omega (\chi, g_2(\omega; t, t_0)), \end{aligned} \quad (3.17)$$

with

$$(\chi, g_1(\omega; t, t_0)) = -i \left(U_\omega^\dagger(t, 0) e^{-iHt} \chi, \int_{t_0}^t ds s U_\omega^\dagger(s, 0) \left(\frac{V(\omega s) - V}{\omega s} - V' \right) e^{-iHs} \psi \right), \quad (3.18)$$

$$(\chi, g_2(\omega; t, t_0)) = -i \int_{t_0}^t ds s ((\tilde{S}(\omega; t, s) - I)\chi, e^{iHs} V' e^{-iHs} \psi). \quad (3.19)$$

By the Schwartz inequality we have for $g_1(\omega; t, t_0)$

$$|(\chi, g_1(\omega; t, t_0))| \leq \|\chi\|_2 \int_{-\infty}^{\infty} ds |s| \left\| \left(\frac{V(\omega s) - V}{\omega s} - V' \right) e^{-iHs} \psi \right\|_2. \quad (3.20)$$

By assumption, $\frac{1}{\omega s}(V(\omega s) - V) - V'$ satisfies the bound (3.1) and tends in norm to zero as $\omega \rightarrow 0$. By (3.2) with $\eta > 2$, the integrand of (3.20) is majorized uniformly in ω by an integrable function and tends pointwise to zero as $\omega \rightarrow 0$. We conclude by dominated convergence that $\lim_{\omega \rightarrow 0} (\chi, g_1(\omega; t, t_0)) = 0$, uniformly with respect to t_0 and t . For $g_2(\omega; t, t_0)$ we have

$$\begin{aligned} |(\chi, g_2(\omega; t, t_0))| &\leq \int_{-\infty}^{\infty} ds |s| \|(\tilde{S}(\omega; t, s) - I)\chi\|_2 \|V' e^{-iHs} \psi\|_2 \\ &\leq \sup_{t, s} \|(\tilde{S}(\omega; t, s) - I)\chi\|_2 \int_{-\infty}^{\infty} ds |s| \|V' e^{-iHs} \psi\|_2. \end{aligned} \quad (3.21)$$

We conclude from (3.16) that $\lim_{\omega \rightarrow 0} (\chi, g_2(\omega; t, t_0)) = 0$, uniformly with respect to t_0 and t . Finally, using once more the decay property (3.2), it is easy to see that, as $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow \infty$, the limits of all terms in (3.17) exist so that, for $\psi = \Omega_- \varphi$, $\varphi \in \mathcal{D}$,

$$\tilde{S}(\omega)\psi = \psi - i\omega \int_{-\infty}^{\infty} ds s e^{iHs} V' e^{-iHs} \psi + \omega (g_1(\omega) + g_2(\omega)), \quad (3.22)$$

where $g_1(\omega)$ and $g_2(\omega)$ obviously still converge weakly to zero, as $\omega \rightarrow 0$, in $\mathbf{R}(\Omega_-)$. When (3.22) is inserted into (3.12), we obtain the result (3.4), (3.5), by setting $g(\omega) = \Omega_+^\dagger (g_1(\omega) + g_2(\omega))$ and using the intertwining relations $H(\alpha)\Omega_\pm^\alpha = \Omega_\pm^\alpha H_0$.

3.2. Discussion of the adiabatic limit

For a time-periodic potential, assuming that we are in the situation (a) described in the introduction, we conclude from (2.20) and (3.3) that

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \overline{\mathcal{P}}_F(\omega, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \mathcal{P}_F^\alpha(\varphi), \quad (3.23)$$

where

$$\mathcal{P}_F^\alpha(\varphi) = \|FS^\alpha\varphi\|_2^2 \quad (3.24)$$

is the transition probability for the static potential $V(\alpha)$. Thus, in the adiabatic limit, the average scattering probability (2.20), for the time-dependent problem, converges to the average of the static quantities associated with the family of static potentials $V(\alpha)$, $0 \leq \alpha \leq 2\pi$. According to (2.14), we also conclude from Proposition 1 that

$$\text{s-}\lim_{\omega \rightarrow 0} S^n(\omega) = S^n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha S^\alpha e^{-in\alpha}, \quad (3.25)$$

so that all the sidebands contribute to the low frequency limit of (2.19). In particular, the statistical distribution $\mathcal{P}^n(\omega, \varphi)$ of emitted and absorbed quanta (2.17) has a non trivial limit as $\omega \rightarrow 0$, and an explicit example is given in Section 5.

Let us discuss now the general structure of the first order correction. According to (3.4), the linear correction to an asymptotic observable $F^\alpha(\omega) = S^{\alpha\dagger}(\omega)FS^\alpha(\omega)$ is, for $\varphi \in \mathcal{D}$,

$$(\varphi, F^\alpha(\omega)\varphi) = (S^\alpha\varphi, FS^\alpha\varphi) + \omega \text{Re}(S^\alpha\varphi, FS_1^\alpha\varphi) + o(\omega). \quad (3.26)$$

From now on, we analyze the structure of this linear correction in formal terms, writing simply

$$F^\alpha(\omega) = F^\alpha + \omega F_1^\alpha + o(\omega), \quad (3.27)$$

where

$$F^\alpha = S^{\alpha\dagger}FS^\alpha, \quad F_1^\alpha = S_1^{\alpha\dagger}FS^\alpha + S^{\alpha\dagger}FS_1^\alpha. \quad (3.28)$$

Equations (3.27) and (3.28) must be understood in the sense of the quadratic form (3.26), with $\varphi \in \mathcal{D}$. Introducing the expression (3.5) into (3.27), (3.28), leads to

$$F_1^\alpha = i \int_{-\infty}^{\infty} dt t e^{iH_0 t} [\Xi^\alpha, F^\alpha] e^{-iH_0 t}, \quad \Xi^\alpha = \Omega_-^{\alpha\dagger} V'(\alpha) \Omega_-^\alpha. \quad (3.29)$$

At this point, it is useful to introduce the symmetric operator (the formal “time operator”)

$$T_0 = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{H_0} p \cdot q + q \cdot p \frac{1}{H_0} \right), \quad (3.30)$$

which represents the derivation with respect to energy in the spectral representation of H_0 [25] i.e.,

$$[T_0, f(H_0)] = i \frac{\partial f(H_0)}{\partial H_0} \quad (3.31)$$

on \mathcal{D} , for differentiable functions of H_0 . From the relation

$$\partial_\alpha S^\alpha = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} S^\alpha \Xi^\alpha e^{-iH_0 t}, \quad (3.32)$$

we deduce

$$\partial_\alpha F^\alpha = i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} [\Xi^\alpha, F^\alpha] e^{-iH_0 t}, \quad (3.33)$$

and then, using $[T_0, e^{\pm iH_0 t}] = \mp t e^{\pm iH_0 t}$, we find that F_1^α can be transformed into the sum of the two contributions

$$F_1^\alpha = K_1^\alpha + D_1^\alpha, \quad (3.34)$$

where

$$K_1^\alpha = -\frac{1}{2} \{T_0, \partial_\alpha F^\alpha\}, \quad D_1^\alpha = \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} \{T_0, [\Xi^\alpha, F^\alpha]\} e^{-iH_0 t}, \quad (3.35)$$

and $\{A, B\} = AB + BA$ denotes the anticommutator. Notice that $[H_0, D_1^\alpha] = 0$, whereas $[H_0, K_1^\alpha] = i\partial_\alpha F^\alpha$, implying that F_1^α does not commute in general with H_0 . However, since K_1^α is a derivative of a periodic function of α , it has zero average so that

$$\overline{F_1} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha F_1^\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha D_1^\alpha = \overline{D_1} \quad (3.36)$$

is indeed an on-shell quantity, in accordance with (2.21).

The term K_1^α may be called ‘‘kinematical’’. It involves only static quantities and it is a manifestation, at first order in ω , of the fact (already discussed in Section 2) that the incoming state will find the potential in a configuration which depends on its time of arrival in the interaction region (we recall that, classically, the observable $-T_0$ has the meaning of an arrival time at the origin). This is illustrated in the one-dimensional example of Section 5.

On the other hand, the contribution D_1^α may be called ‘‘dynamical’’ since it incorporates the genuine new dynamical effects of the potential on the scattering. The structure of D_1^α is also briefly analyzed in Section 5. Here we conclude from the following corollary that potentials of the form $v(x, \mu(t))$, depending on t only through a single real scalar function $\mu(t)$, have no first order dynamical corrections to the averaged probabilities (2.20). This includes for instance potentials of the form (1.1), setting $\lambda(t) = \mu(t)$, and potentials of the form (1.2) with $a(t) = a(\mu(t))$.

Corollary. *Let $\mu(t)$ be a 2π -periodic real function of t , and $v(x, \mu(t))$ a potential satisfying the assumptions of Proposition 1, part (ii). Then $\overline{F_1} = \overline{D_1} = 0$.*

Proof. One has $v'(x, \mu(t)) = \mu'(t)w(x, \mu(t))$ with $w(x, \mu(t)) = \partial_\mu v(x, \mu)|_{\mu=\mu(t)}$. According to (3.29), F_1^α is of the form $F_1^\alpha = \mu'(\alpha)G_1^\alpha$ where G_1^α is defined as (3.29) with $v'(x, \mu(\alpha))$ replaced by $w(x, \mu(\alpha))$. Clearly, for $\varphi \in \mathcal{D}$, the function $(\varphi, G_1^\alpha \varphi) = g(\mu(\alpha))$ depends on α only through $\mu(\alpha)$, and $g(\mu)$ is finite for each μ (μ in compact sets) by the estimate of Proposition 1, part (ii). Thus, the first order correction can be written as $(\varphi, F_1^\alpha \varphi) = \mu'(\alpha)g(\mu(\alpha))$, and its average

$$(\varphi, \overline{F_1} \varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \mu'(\alpha)g(\mu(\alpha)) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\mu(\alpha)} d\mu g(\mu) \Big|_{-\pi}^{\pi} = 0 \quad (3.37)$$

vanishes as a consequence of the periodicity of $\mu(\alpha)$.

The linear order correction to the adiabatic limit of sidebands is

$$S^n(\omega) = S^n + \omega S_1^n + o(\omega), \quad (3.38)$$

with

$$S_1^n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha S_1^\alpha e^{in\alpha}. \quad (3.39)$$

For the asymptotic observables $F^n(\omega) = S^{n\dagger}(\omega)FS^n(\omega)$, we obtain

$$F^n(\omega) = F^n + \omega F_1^n + o(\omega), \quad (3.40)$$

where

$$F^n = S^{n\dagger}FS^n, \quad F_1^n = S_1^{n\dagger}FS^n + S^{n\dagger}FS_1^n. \quad (3.41)$$

Introducing $[T_0, e^{-iH_0t}] = te^{-iH_0t}$ into (3.5), we can write S_1^α as the sum

$$S_1^\alpha = S_{1,A}^\alpha + S_{1,B}^\alpha, \quad (3.42)$$

where $S_{1,A}^\alpha = -\partial_\alpha S^\alpha T_0$ (use (3.32)) and $S_{1,B}^\alpha$, which commutes with H_0 , is given by

$$S_{1,B}^\alpha = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0t} S^\alpha \Xi^\alpha T_0 e^{-iH_0t}. \quad (3.43)$$

According to this decomposition, we find that

$$F_1^n = F_{1,A}^n + F_{1,B}^n, \quad (3.44)$$

where

$$F_{1,A}^n = S^{n\dagger}FS_{1,A}^n + S_{1,A}^{n\dagger}FS^n = -in [T_0, F^n] = n \frac{\partial F^n}{\partial H_0}, \quad (3.45)$$

and

$$F_{1,B}^n = S^{n\dagger}FS_{1,B}^n + S_{1,B}^{n\dagger}FS^n. \quad (3.46)$$

For the last equality of (3.45) we have used (3.31), and $S_{1,A}^n, S_{1,B}^n$ are the Fourier components of $S_{1,A}^\alpha$ and $S_{1,B}^\alpha$ respectively. The first order contributions to sidebands sum up to the total first order correction to scattering (3.36) i.e.,

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} F_1^n = \bar{F}_1 = \bar{D}_1. \quad (3.47)$$

In general, individual sidebands have nonvanishing first order corrections. However, for the class of potentials considered in the Corollary, these corrections have to sum to zero. Examples are given in Section 5.

3.3. Energy transfer in the adiabatic limit

Since the energy of the scattered particle is not conserved, it is of interest to investigate in more details the energy transfer (2.23) between the particle and the external field. The expression of $\Delta^\alpha(\omega)$ up to second order in ω is readily obtained by inserting the expansion (3.4) into (2.23). One finds

$$\Delta^\alpha(\omega) = \omega \Delta_1^\alpha + \omega^2 \Delta_2^\alpha + o(\omega^2), \quad (3.48)$$

with

$$\Delta_1^\alpha = iS^{\alpha\dagger}\partial_\alpha S^\alpha, \quad \Delta_2^\alpha = i(S_1^{\alpha\dagger}\partial_\alpha S^\alpha + S^{\alpha\dagger}\partial_\alpha S_1^\alpha). \quad (3.49)$$

We first comment on the first order term, which is given by (see (3.32))

$$\Delta_1^\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} \Xi^\alpha e^{-iH_0 t}. \quad (3.50)$$

For a time-dependent perturbation of the type (1.1) with $w_2(x) \geq 0$ (resp. $w_2(x) \leq 0$) we clearly have $\Xi^\alpha = \lambda'(\alpha)\Omega_-^{\alpha\dagger}W_2\Omega_-^\alpha$, where $\Omega_-^{\alpha\dagger}W_2\Omega_-^\alpha$ is a positive (resp. negative) operator. Hence, the sign of the energy transfer is determined by that of $\lambda'(\alpha)$.

However, for the class of potentials considered in the Corollary, the averaged first order energy transfer $\overline{\Delta}_1$ vanishes by the same arguments and one has to examine the averaged second order term $\overline{\Delta}_2$. After an integration by parts, using (3.5) and $[T_0, e^{\pm iH_0 t}] = \mp t e^{\pm iH_0 t}$, one can write $\overline{\Delta}_2$ in the form

$$\begin{aligned} \overline{\Delta}_2 &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha (S_1^{\alpha\dagger} S^\alpha \Delta_1^\alpha + \Delta_1^\alpha S^{\alpha\dagger} S_1^\alpha) \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} (\Xi^\alpha T_0 \Delta_1^\alpha - \Delta_1^\alpha T_0 \Xi^\alpha) e^{-iH_0 t}. \end{aligned} \quad (3.51)$$

This formula can be further reduced if the spectrum of H_0 is simple. For instance, for potentials of the form (1.1) invariant under rotations, we can restrict the formula to a subspace with fixed angular momentum. In such subspaces, Δ_1^α reduces to a function of energy only, given by

$$\Delta_1^\alpha(E) = 2\pi \langle E | \Xi^\alpha | E \rangle, \quad (3.52)$$

where, in the spherically symmetric case, $|E\rangle$ stands for the improper eigenvector of H_0 with fixed angular momentum. Then,

$$\begin{aligned} \overline{\Delta}_2(E) &= i \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \Delta_1^\alpha(E) (\langle E | \Xi^\alpha T_0 | E \rangle - \langle E | T_0 \Xi^\alpha | E \rangle) \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha \Delta_1^\alpha(E) \partial_E \langle E | \Xi^\alpha | E \rangle = \frac{1}{4\pi} \partial_E \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha (\Delta_1^\alpha(E))^2, \end{aligned} \quad (3.53)$$

where for the second equality we have used $\langle E | T_0 = i\partial_E \langle E |$. Thus, at given energy E , there is a positive or negative energy transfer according to the sign of the quantity (3.53). One can check on examples that both signs can occur and that these signs are very sensitive to the value of the incoming energy E .

4. The high frequency limit

4.1. The high frequency theorem

As mentioned in the introduction, the high frequency limit is also of interest in various physical situations, in particular in the theory of ionisation of atoms in strong laser fields. The point here is that the fast oscillating Fourier components of the potential do not contribute to the scattering as $\omega \rightarrow \infty$. We introduce explicitly the Fourier series of the periodic interaction $V(t) = V(t + 2\pi)$,

$$V(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{int}, \quad (4.1)$$

where V_n is the multiplication operator by

$$v_n(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt v(x, t) e^{-int} = v_{-n}^*(x). \quad (4.2)$$

In this section we make the hypothesis that the potential is sufficiently differentiable with respect to its time and space variables. More precisely, we shall assume that $v(x, t)$ satisfy the conditions

- (1) $v(x, t)$ is twice continuously differentiable with respect to t , and both $v(x, t)$ and its time-derivatives satisfy (3.1).
- (2) the average potential $v_0(x)$ defines a static scattering system (H, H_0) , $H = H_0 + V_0$, with complete wave operators Ω_{\pm} and scattering operator S , for which the propagation property (3.2) is true;
- (3) $v(x, t)$ is n -times differentiable with respect to x and the partial derivatives $\partial_x^m v(x, t)$ and $\partial_t \partial_x^m v(x, t)$ satisfy (3.1), $m = 1, \dots, n$, $n \geq 1$, where $\partial_x^m = \partial_{x_1}^{m_1} \dots \partial_{x_d}^{m_d}$, $m = m_1 + \dots + m_d$.

According to (1), by partial integration, one has

$$|v_n(x)| \leq \frac{c}{n^2} \langle x \rangle^{-\eta}, \quad \eta > 1, \quad (4.3)$$

so that the series (4.1) are norm convergent. We decompose the time-dependent hamiltonian (2.7) as (setting here $\alpha = 0$)

$$H(\omega t) = H + \tilde{V}(\omega t), \quad H = H_0 + V_0, \quad (4.4)$$

where

$$\tilde{V}(t) = V(t) - V_0 = \sum_{n \neq 0} V_n e^{int} \quad (4.5)$$

has the same properties as $V(t)$. By condition (2), we can apply the chain rule to the pair of scattering systems $(H(\omega t), H)$ and (H, H_0) . The arguments are identical to those

leading to (3.12) in the previous section. This enables us to represent the scattering operator $S(\omega)$ of the full time-dependent problem as

$$S(\omega) = \Omega_+^\dagger \tilde{S}(\omega) \Omega_-, \quad \tilde{S}(\omega) = \tilde{\Omega}_+^\dagger(\omega) \tilde{\Omega}_-(\omega). \quad (4.6)$$

Proposition 2. (i) Assume that conditions (1)-(3) hold for $n \geq 2$. Then,

$$s\text{-}\lim_{\omega \rightarrow \infty} S^\alpha(\omega) = S, \quad (4.7)$$

where $S = \Omega_+^\dagger \Omega_-$ is the scattering operator for the static average potential $v_0(x)$.

(ii) If in addition (3) holds for $n \geq 6$, then for $\varphi \in \mathcal{D}$

$$S^\alpha(\omega)\varphi = S\varphi + \omega^{-2} S_2\varphi + \omega^{-2} f^\alpha(\omega), \quad (4.8)$$

where

$$S_2\varphi = i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} \Omega_+^\dagger M \Omega_- e^{-iH_0 t} \varphi, \quad (4.9)$$

$$M = \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} \left(\frac{1}{2} (V_n V_n^\dagger H + H V_n V_n^\dagger) - V_n H V_n^\dagger \right). \quad (4.10)$$

The vector $f^\alpha(\omega)$ converges strongly to zero as $\omega \rightarrow \infty$.

Proof. (i) We consider the case $\alpha = 0$, dropping the index α . In view of (4.6), it suffices to show that $s\text{-}\lim_{\omega \rightarrow \infty} \tilde{S}(\omega)\psi = \psi$, for $\psi = \Omega_- \varphi$, $\varphi \in \mathcal{D}$. We can represent $\tilde{S}(\omega)\psi$ by the formula

$$\tilde{S}(\omega)\psi = \psi - i \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) \tilde{V}(\omega s) e^{-iHs} \psi. \quad (4.11)$$

Introducing

$$\tilde{V}(t) = \frac{d\tilde{V}_1(t)}{dt}, \quad \tilde{V}_1(t) = - \sum_{n \neq 0} \frac{i}{n} V_n e^{int} \quad (4.12)$$

and performing an integration by parts in the last term of (4.11), one obtains

$$\begin{aligned} -i \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) \tilde{V}(\omega s) e^{-iHs} \psi &= -\frac{i}{\omega} e^{iHt} U_\omega(t, s) \tilde{V}_1(\omega s) e^{-iHs} \psi \Big|_{t_0}^t \\ &\quad - \frac{1}{\omega} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) (\tilde{V}(\omega s) \tilde{V}_1(\omega s) + [H, \tilde{V}_1(\omega s)]) e^{-iHs} \psi. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Using that $\tilde{V}_1(\omega s)$ is bounded uniformly with respect to ω , the limit $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow \infty$, of the integrated term vanishes by the estimate (3.2) ($\psi = \Omega_- \varphi$). On the other hand, the last term in (4.13) can be estimated by

$$\frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} ds \| \tilde{V}(\omega s) \tilde{V}_1(\omega s) e^{-iHs} \psi \|_2 + \frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} ds \| [H, \tilde{V}_1(\omega s)] e^{-iHs} \psi \|_2. \quad (4.14)$$

By (3.2), the first integral in (4.14) is convergent. To control the second one, we observe that

$$[H, \tilde{V}_1(\omega s)] = [H_0, \tilde{V}_1(\omega s)] = \frac{1}{2m} \left(-2i \sum_{j=1}^d \partial_j \tilde{V}_1(\omega s) p_j - \sum_{j=1}^d \partial_j^2 \tilde{V}_1(\omega s) \right), \quad (4.15)$$

where ∂_j are the partial space-derivatives, and p_j are the components of the momentum operator. Thus, the second term in (4.14) is majorized by a sum of contributions of the form

$$\frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} ds \|\partial_j \tilde{V}_1(\omega s) p_j e^{-iHs} \psi\|_2 \quad (4.16)$$

and

$$\frac{1}{\omega} \int_{-\infty}^{\infty} ds \|\partial_j^2 \tilde{V}_1(\omega s) e^{-iHs} \psi\|_2. \quad (4.17)$$

Our hypothesis on the potential imply that $\partial_j \tilde{V}_1(\omega s)$ as well as $\partial_j^2 \tilde{V}_1(\omega s)$ verify (3.1) so that the s -integral in (4.17) is finite and independent of ω , by (3.2). For (4.16), using the intertwining relation, we write

$$\begin{aligned} \|\partial_j \tilde{V}_1(\omega s) p_j e^{-iHs} \psi\|_2 &= \|\partial_j \tilde{V}_1(\omega s) p_j (H + \mu)^{-1} e^{-iHs} \chi\|_2 \\ &\leq \|\partial_j \tilde{V}_1(\omega s) \langle q \rangle^\eta\| \|\langle q \rangle^{-\eta} p_j (H + \mu)^{-1} \langle q \rangle^\eta\| \times \\ &\times \|\langle q \rangle^{-\eta} e^{-iHs} \chi\|_2. \end{aligned} \quad (4.18)$$

In (4.18), $(H + \mu)^{-1}$ is the resolvent of H evaluated at a sufficiently large positive number μ (H is bounded below) and $\chi = \Omega_-(H_0 + \mu)\varphi$, with $(H_0 + \mu)\varphi$ still belonging to \mathcal{D} . It is known that the second factor in the r.h.s. of the inequality is finite (Lemma 3 of [20], see also Appendix B), so the decay (3.2) applies also to (4.18). We conclude that the quantity (4.14) is $O(\omega^{-1})$. Thus, $S(\omega) \rightarrow S$ strongly on \mathcal{D} , as $\omega \rightarrow 0$, and since $S(\omega)$ is uniformly bounded with respect to ω , the convergence holds on the whole \mathcal{H} . The proof is the same for $S^\alpha(\omega)$, $\alpha \neq 0$, since it amounts simply to replace everywhere V_n by $V_n e^{i n \alpha}$.

(ii) To find the first non vanishing correction to the high frequency limit (4.7), we carry on the integration by parts on the last term of (4.13). Introducing

$$\tilde{V}_1(t) = \frac{d\tilde{V}_2(t)}{dt}, \quad \tilde{V}_2(t) = - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} V_n e^{int} \quad (4.19)$$

and observing that $\tilde{V}(t)\tilde{V}_1(t) = (1/2)d\tilde{V}_1^2(t)/dt$, one finds the following contributions

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{\omega^2} e^{iHt} U_\omega(t, s) \left([H, \tilde{V}_2(\omega s)] + \frac{1}{2} \tilde{V}_1^2(\omega s) \right) e^{-iHs} \psi \Big|_{t_0}^t \\ & + \frac{i}{\omega^2} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) [H, [H, \tilde{V}_2(\omega s)]] e^{-iHs} \psi \\ & + \frac{i}{\omega^2} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) \tilde{V}(\omega s) [H, \tilde{V}_2(\omega s)] e^{-iHs} \psi \\ & + \frac{i}{\omega^2} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) \frac{1}{2} [H, \tilde{V}_1^2(\omega s)] e^{-iHs} \psi \\ & + \frac{i}{2\omega^2} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) \frac{1}{2} \tilde{V}(\omega s) \tilde{V}_1^2(\omega s) e^{-iHs} \psi. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Using the same arguments as for (4.13), the integrated term goes to zero as $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow \infty$. Introducing

$$\tilde{V}_2(t) = \frac{d\tilde{V}_3(t)}{dt}, \quad \tilde{V}_3(t) = \sum_{n \neq 0} \frac{i}{n^3} V_n e^{int} \quad (4.21)$$

and $\tilde{V}(t)\tilde{V}_1^2(t) = (1/3)d\tilde{V}_1^3(t)/dt$, the first and last integral of (4.20) can be integrated by parts one step further and seen to be $O(\omega^{-3})$ by an immediate generalization of the treatment of the terms (4.13). The multiple commutator of local potentials with H can be rearranged as in (4.15) as sum of monomials of derivatives of these potentials times powers of the momentum, provided that assumption (ii) holds. Then, bounds can be obtained as in (4.18) using the result of Appendix A. For the second and third integrals, we write

$$\begin{aligned} [H, \tilde{V}_1^2(t)] &= - \sum_{n, m \neq 0} \frac{1}{nm} [H, V_n V_m] e^{i(n+m)t} \\ &= \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} [H, V_n V_{-n}] - \sum_{\substack{n, m \neq 0 \\ n \neq m}} \frac{1}{nm} [H, V_n V_m] e^{i(n+m)t} \end{aligned} \quad (4.22)$$

and

$$\begin{aligned} \tilde{V}(t)[H, \tilde{V}_2(t)] &= - \sum_{n, m \neq 0} \frac{1}{m^2} V_n [H, V_m] e^{i(n+m)t} \\ &= - \sum_{n \neq 0} \frac{1}{n^2} V_n [H, V_{-n}] - \sum_{\substack{n, m \neq 0 \\ n \neq m}} \frac{1}{m^2} V_n [H, V_m] e^{i(n+m)t}. \end{aligned} \quad (4.23)$$

The time-dependent contributions of (4.22) and (4.23) can be integrated by parts (integrating the phase factors $e^{i(n+m)t}$), and controlled by the same arguments as hereabove. Finally, combining together the time independent contributions of (4.22) and (4.23), we remain with the term

$$\frac{i}{\omega^2} \int_{t_0}^t ds e^{iHt} U_\omega(t, s) M e^{-iHs} \psi, \quad (4.24)$$

up to a correction of order ω^{-3} . As a consequence of the same estimates as in part (i) of the proposition, one sees easily that $e^{iHt} U_\omega(t, s)$ tends pointwise strongly to e^{-iHs} , as $\omega \rightarrow \infty$, uniformly with respect to t (note that for any s , $e^{-iHs} \psi = \Omega_- e^{-iH_0 s} \varphi$ with $e^{-iH_0 s} \varphi \in \mathcal{D}$). Thus, using dominated convergence, the strong limit $t_0 \rightarrow -\infty$, $t \rightarrow \infty$ and $\omega \rightarrow \infty$ of the integral (4.24) exists and, by intertwining and (4.6), is given by the result of part (ii) of the proposition.

4.2. Discussion of the high frequency limit

According to Proposition 2, as $\omega \rightarrow \infty$, the scattering operator $S^\alpha(\omega)$ approaches the static S associated with the time-independent average potential $v_0(x)$. Since the latter is independent of α , we also find that, in this limit, the scattering process becomes independent of the initial phase α of the potential or, equivalently, of the time of incidence of the incoming particle in the interaction region.

According to (2.14), we also conclude from part (i) of Proposition 2 that

$$\text{s-}\lim_{\omega \rightarrow \infty} S^n(\omega) = 0. \quad (4.25)$$

for $n \neq 0$. Contrary to the adiabatic case, the sidebands do not contribute to the high frequency limit of (2.19). In fact, if the potential satisfy the assumptions of part (ii) of Proposition 2, we have the stronger result

$$S^n(\omega) = o(\omega^{-2}) \quad (4.26)$$

for $n \neq 0$, since the correction (4.9) is independent of α .

The first non vanishing correction to the asymptotic observable $F^\alpha(\omega) = S^{\alpha\dagger}(\omega)FS^\alpha(\omega)$ is, for $\varphi \in \mathcal{D}$,

$$(\varphi, F^\alpha(\omega)\varphi) = (S\varphi, FS\varphi) + \omega^{-2} \text{Re}(S\varphi, FS_2\varphi) + o(\omega^{-2}). \quad (4.27)$$

On a more formal level, we can also write

$$F^\alpha(\omega) = F_0 + \omega^{-2} F_2 + o(\omega^{-2}), \quad (4.28)$$

where $F_0 = S^\dagger FS$ and

$$F_2 = S^\dagger FS_2 + S_2^\dagger FS = i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} [F_0, \Omega_-^\dagger M \Omega_-] e^{-iH_0 t}. \quad (4.29)$$

For a potential of the form (1.1), the operator M is given by

$$\begin{aligned} M &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{|\lambda_n|^2}{2n^2} (W_2^2 H_0 + H_0 W_2^2 - 2W_2 H_0 W_2) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{|\lambda_n|^2}{2n^2} [[H_0, W_2], W_2] \\ &= - \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{|\lambda_n|^2}{2n^2} \frac{1}{m} \sum_{j=1}^d (\partial_j W_2)^2, \end{aligned} \quad (4.30)$$

where for the last equality we have used (4.15), and W_2 denotes the multiplication operator by the function $w_2(x)$.

5. Application to one-dimensional scattering

5.1. The adiabatic limit for transmission and reflection probabilities

We introduce the improper eigenvectors $|E, \pm\rangle$ of H_0 , corresponding to positive and negative momentum p , satisfying the orthogonality relation

$$\langle E, \sigma | E', \sigma' \rangle = \delta_{\sigma, \sigma'} \delta(E - E'), \quad (5.1)$$

and the projection operators

$$\int_0^\infty dE |E, \pm\rangle \langle E, \pm| = F_\pm, \quad F_+ + F_- = I \quad (5.2)$$

onto the set of states with positive and negative momentum. Then, if φ is an incoming state describing a particle approaching the potential from the left i.e., $F_+\varphi = \varphi$, the corresponding average transmission and reflection probabilities are given by

$$\overline{\mathcal{P}}_\pm(\omega, \varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi d\alpha \| F_\pm S^\alpha(\omega)\varphi \|_2^2 = \int_0^\infty dE \overline{\mathcal{P}}_\pm(\omega, E) |\varphi(E)|^2. \quad (5.3)$$

According to Proposition 1, one obtains

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \overline{\mathcal{P}}_\pm(\omega, \varphi) = \int_0^\infty dE \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi d\alpha |A_\pm^\alpha(E)|^2 \right) |\varphi(E)|^2, \quad (5.4)$$

where $A_\pm^\alpha(E) = \langle \pm | S^\alpha(E) | + \rangle$ are respectively the transmission and reflection amplitudes for an incident particle with momentum $k = \sqrt{2mE}$ and static potential $v(x, \alpha)$.

One can use (5.4) to investigate the effect, on the static transmission and reflection probabilities, of a slow time-dependent perturbation of the potential. For the case of a displaced potential of the form (1.2) the answer is clear since the $A_\pm^\alpha(E)$ differ from $A_\pm(E) \equiv A_\pm^0(E)$ only by a phase factor and thus the average probability (5.4) is equal to that determined by $v(x)$. However, for an additive time-dependent perturbation, both increase or decrease of the transmission and reflection probabilities can occur. More specifically, consider an interaction of the form (1.1) with $\lambda(\omega t) = \lambda_0 \cos(\omega t)$, $\lambda_0 > 0$, and denote by $A_\pm(E, \lambda)$ the transmission and reflection amplitudes for the static potential $w_1(x) + \lambda w_2(x)$. If, for a given energy E , $|A_\pm(E, \lambda)|^2$ is a convex (concave) function of λ , $|\lambda| \leq \lambda_0$, then the perturbation of the coupling will increase (decrease) the probability in the adiabatic limit. To show this, we have to compare the average (5.4) with the static ($\lambda_0 = 0$) probability $|A_\pm(E, 0)|^2$. If $|A_\pm(E, \lambda)|^2$ is convex, we have

$$|A_\pm^\alpha(E)|^2 = |A_\pm(E, \lambda_0 \cos \alpha)|^2 \geq |A_\pm(E, 0)|^2 + \lambda_0 \cos \alpha \partial_\lambda |A_\pm(E, \lambda)|_{\lambda=0}^2, \quad (5.5)$$

yielding

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi d\alpha |A_\pm^\alpha(E)|^2 \geq |A_\pm(E, 0)|^2, \quad (5.6)$$

and conversely for the concave case (see also the related discussion in [24]).

Let us now analyze the form taken by the first order ‘‘kinematical’’ and ‘‘dynamical’’ corrections (3.35) to transmission and reflection probabilities. For K_1^α we have

$$\begin{aligned} (\varphi, K_1^\alpha \varphi) &= -\frac{1}{2} (\varphi, \{T_0, \partial_\alpha |A_\pm^\alpha|^2\} \varphi) = -\text{Re} (T_0 \varphi, \partial_\alpha |A_\pm^\alpha|^2 \varphi) \\ &= \int_0^\infty dE \beta'(E) \partial_\alpha |A_\pm^\alpha(E)|^2 |\varphi(E)|^2, \end{aligned} \quad (5.7)$$

where for the last equality we have used (3.31), and $\beta'(E) = \partial_E \arg \varphi(E)$. If $\varphi(E)$ is real, this correction vanishes. On the contrary, if $\varphi(E)$ has a nonvanishing phase $\beta(E)$, we observe that the mean position of the incoming state φ is expressed by

$$(\varphi, q\varphi) = \int_0^\infty dE x_E |\varphi(E)|^2, \quad (5.8)$$

where $x_E = -v\beta'(E)$ and $v = k/m$, $k = \sqrt{2mE}$, is the velocity. Thus, we may write, to first order in ω ,

$$\begin{aligned} (\varphi, (F^\alpha + \omega K_1^\alpha)\varphi) &= \int_0^\infty dE \left(|A_\pm^\alpha(E)|^2 - \omega \frac{x_E}{v} \partial_\alpha |A_\pm^\alpha(E)|^2 \right) |\varphi(E)|^2 \\ &= \int_0^\infty dE |A_\pm^{\alpha - \omega(x_E/v)}(E)|^2 |\varphi(E)|^2 + o(\omega). \end{aligned} \quad (5.9)$$

For $\varphi(E)$ real and well peaked at about E , $-x_E/v$ represents the time difference between the preparation of the two initial states $e^{i\beta(E)}\varphi(E)$ and $\varphi(E)$, so that (5.9) is a manifestation, at first order in ω , of the fact that the two states experience the action of the potential with a time lag $-x_E/v$.

To analyze the structure of the ‘‘dynamical’’ contribution D_1^α , we note that, formally, $\langle E, \pm | T_0 = i\partial_E \langle E, \pm |$, and find

$$(\varphi, D_1^\alpha \varphi) = \int_0^\infty dE D_1^\alpha(E) |\varphi(E)|^2, \quad (5.10)$$

where

$$D_1^\alpha(E) = i\pi \langle E, + | \{T_0, [\Xi^\alpha, F^\alpha]\} | E, + \rangle = 2\pi \operatorname{Re} \partial_{E'} \langle E, + | [\Xi^\alpha, F^\alpha] | E', + \rangle |_{E'=E}. \quad (5.11)$$

Working out (5.11) one step further, $D_1^\alpha(E)$ can be rewritten as the sum

$$D_1^\alpha(E) = 2\pi \langle E, + | \Xi^\alpha | E, + \rangle \partial_E |A_+^\alpha(E)|^2 + I^\alpha(E), \quad (5.12)$$

where the interference contribution $I^\alpha(E)$ is given by

$$\begin{aligned} I^\alpha(E) &= 2\pi \operatorname{Re} \partial_{E'} \left[A_+^{\alpha*}(E) A_-^\alpha(E) \langle E', + | \Xi^\alpha | E, - \rangle \right. \\ &\quad \left. - A_+^\alpha(E') A_-^{\alpha*}(E') \langle E', - | \Xi^\alpha | E, + \rangle \right]_{E'=E}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Here we shall not work out any further the expressions for (5.12), (5.13), which are rather complicated. Notice however that in the special case of a barrier (or well), the matrix elements $\langle E', \sigma' | \Xi^\alpha | E, \sigma \rangle$ are entirely expressible in terms of the transmission and reflection coefficients, by simple integration (see [26] for the method).

5.2. The adiabatic limit for sidebands

The adiabatic limit of transmitted and reflected sidebands

$$\mathcal{P}_{\pm}^n(\omega, \varphi) = \| F_{\pm} S^n(\omega) \varphi \|_2^2 = \int_0^{\infty} dE \mathcal{P}_{\pm}^n(\omega, E) |\varphi(E)|^2. \quad (5.14)$$

is

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \mathcal{P}_{\pm}^n(\omega, \varphi) = \int_0^{\infty} dE \mathcal{P}_{\pm}^n(E) |\varphi(E)|^2, \quad (5.15)$$

where

$$\mathcal{P}_{\pm}^n(E) = \left| \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha A_{\pm}^{\alpha}(E) e^{in\alpha} \right|^2. \quad (5.16)$$

For a modulated potential of the form (1.1), the adiabatic sidebands probabilities (5.16) cannot in general be evaluated explicitly (an exception is the modulated δ -function barrier which was considered in [4]). On the other hand, for a displaced potential of the form (1.2), one has $S^{\alpha} = e^{ipa(\alpha)} S e^{-ipa(\alpha)}$, yielding

$$\mathcal{P}_{+}^n(E) = \delta_{n,0} |A_{+}(E)|^2, \quad \mathcal{P}_{-}^n(E) = |c_n(E)|^2 |A_{-}(E)|^2, \quad (5.17)$$

where $A_{\pm}(E)$ are respectively the transmission and reflection amplitudes for the potential $v(x)$, and

$$c_n(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i(n\alpha - 2ka(\alpha))}. \quad (5.18)$$

Thus, the statistics of quanta (2.17) i.e.,

$$\mathcal{P}^n(E) = \mathcal{P}_{+}^n(E) + \mathcal{P}_{-}^n(E) \quad (5.19)$$

is fully determined by the coefficients $c_n(E)$ in the adiabatic limit. In particular, for $a(\alpha) = a_0 \cos \alpha$, we have $c_n(E) = i^n J_n(-2ka_0)$, where the J_n are the Bessel functions of the first kind.

For the displaced potential we can even find explicitly the n -dependence of the first order corrections. Indeed, one has

$$S_{1,B}^{\alpha} = a'(\alpha) e^{ia(\alpha)p} S_{1,B} e^{-ia(\alpha)p} \quad (5.20)$$

with

$$S_{1,B} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} S \Xi T_0 e^{-iH_0 t}, \quad \Xi = \Omega_{-}^{\dagger} (\partial_x V) \Omega_{-} \quad (5.21)$$

independent of α . Thus, using

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha a'(\alpha) e^{i(n\alpha - 2ka(\alpha))} = \frac{n}{2k} c_n(E), \quad (5.22)$$

we immediately find for the reflected sidebands

$$\mathcal{P}_{-}^n(\omega, E) = \mathcal{P}_{-}^n(E) + \omega \mathcal{P}_{-,1}^n(E) + o(\omega) \quad (5.23)$$

where $\mathcal{P}_-^n(E)$ is given by (5.17) and

$$\mathcal{P}_{-,1}^n(E) = n \partial_E \mathcal{P}_-^n(E) + \frac{n}{2k} |c_n(E)|^2 B(E). \quad (5.24)$$

The first term of (5.24) arises from the contribution (3.45) and $B(E)$ is the on-shell part of the operator

$$B = F_+ \left(S^\dagger F_- S_{1,B} + S_{1,B}^\dagger F_- S \right) F_+. \quad (5.25)$$

In the same way, one finds that the correction to the transmitted sidebands vanishes for all n , i.e.,

$$\mathcal{P}_+^n(\omega, E) = \mathcal{P}_+^n(E) + o(\omega). \quad (5.26)$$

One sees that the statistics of sidebands at first order is again determined by the knowledge of the coefficients $c_n(E)$, given by (5.18). At this order, only the reflection of the particles is accompanied by a process of emission or absorption.

5.3. Energy transfer

We can also immediately deduce the form of the second order energy transfer from (2.24), (5.23) and (5.26),

$$\bar{\Delta}_2(E) = \sum_{-\infty}^{\infty} n \left(\mathcal{P}_{-,1}^n(E) + \mathcal{P}_{+,1}^n(E) \right) = \frac{C(E)}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha (a'(\alpha))^2. \quad (5.27)$$

The last equality follows from (5.24) and the fact that

$$\sum_{-\infty}^{\infty} n^2 |c_n(E)|^2 = \frac{4mE}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha (a'(\alpha))^2. \quad (5.28)$$

The function $C(E)$ determines the sign of the energy transfer and can be found from (5.24),(5.25). We can give a more explicit expression for $C(E)$ in the case of a parity invariant potential $v(x) = v(-x)$. For a particle coming from the left, we have to compute the restriction of (3.51) to the subspace $F_+ \mathcal{H}$. According to

$$\Delta_1^\alpha = a'(\alpha) e^{ipa(\alpha)} \Delta_1 e^{-ipa(\alpha)}, \quad (5.29)$$

where

$$\Delta_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} \Xi e^{-iH_0 t}, \quad \Xi = \Omega_-^\dagger (\partial_x V) \Omega_-, \quad (5.30)$$

and to

$$e^{ipa(\alpha)} T_0 e^{-ipa(\alpha)} = T_0 + \sqrt{\frac{2m}{H_0}} \hat{p} a(\alpha), \quad \hat{p} = p/|p|, \quad (5.31)$$

one obtains

$$\begin{aligned} F_+ \bar{\Delta}_2 F_+ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha (a'(\alpha))^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} i F_+ (\Xi T_0 \Delta_1 - \Delta_1 T_0 \Xi) F_+ e^{-iH_0 t} \\ &+ (a'(\alpha))^2 a(\alpha) \sqrt{\frac{2m}{H_0}} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{iH_0 t} i F_+ (\Xi \hat{p} \Delta_1 - \Delta_1 \hat{p} \Xi) F_+ e^{-iH_0 t}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Using $\hat{p} = F_+ - F_-$, the second contribution in (5.32) vanishes. For the first one we insert the identity $I = F_+ + F_-$ between Ξ and Δ_1 , and use the fact that $F_+\Xi F_- = -F_-\Xi F_+$ (since $\partial_x v(x) = -\partial_x v(-x)$). This yields,

$$F_+\overline{\Delta}_2 F_+ = \frac{1}{2} \frac{1}{(a'(\alpha))^2} F_+ \frac{\partial \Delta_1^2}{\partial H_0} F_+ \quad (5.33)$$

and the same result remains clearly true for a particle coming from the right (i.e., replacing F_+ by F_-). Finally, introducing the improper eigenvectors (5.1), we immediately find that the on-shell part $C(E)$ of (5.33) takes the form of an energy derivative, given by (Ξ defined in (5.21))

$$C(E) = 4\pi^2 \partial_E \left(\langle E, +|\Xi|E, +\rangle^2 + |\langle E, -|\Xi|E, +\rangle|^2 \right). \quad (5.34)$$

This quantity can be positive or negative, depending on the value of the incoming energy E .

5.4. The high frequency limit

We conclude our study of one-dimensional examples by asking what is the effect, on the transmission probability, of introducing a high frequency time-dependent perturbation. For modulated barriers of the form (1.1), with $\lambda(\omega t) = \lambda_0 \cos(\omega t)$, the average potential is equal to the static one ($\lambda_0 = 0$). Thus, the addition of a time-periodic perturbation of zero average has no effect on the scattering process in the limit $\omega \rightarrow \infty$. The situation is different for an oscillating position potential of the form (1.2), with say $a(\omega t) = a_0 \cos(\omega t)$, since the effective static potential

$$v_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha v(x - a_0 \cos \alpha) \quad (5.35)$$

may in general differ appreciably from the static $v(x)$. For instance, if $v(x)$ is a barrier and a_0 is sufficiently large, $v_0(x)$ is considerably broader and reduced in height with respect to $v(x)$. It can also develop a bimodal structure which may give rise to interesting resonance effects at some specified energies. The effective potential (5.35) is known as the ‘‘dressed’’ potential associated to $v(x)$, in the theory of atoms in intense, high frequency laser fields [7-10].

Finally, we specialize the correction (4.29) in the case of an oscillating potential of the form (1.1) with $\lambda(t) = \lambda_0 \cos t$. According to (4.30), we find for the transmission probability the formula ($A_+(E)$ denotes here the static amplitude for $\lambda_0 = 0$)

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_+(\omega, E) &= |A_+(E)|^2 \\ &+ \left(\frac{\lambda_0}{\omega} \right)^2 \text{Im} \left(A_+^*(E) A_-(E) \int_{-\infty}^{\infty} dx (\partial_x w_2(x))^2 \psi_-^*(E, x) \psi_+(E, x) \right) + o(\omega^{-2}). \end{aligned} \quad (5.36)$$

where the kernels $\psi_{\pm}(E, x) = \sqrt{2\pi k/m} \langle x | \Omega_{\pm} | E, \pm \rangle$ are the usual solutions of the stationary Schrödinger equation for the averaged potential $v_0(x) = w_1(x)$. When $w_1(x) = 0$, the ω^{-2} term vanishes in (5.36) (since $A_{-}(E) = 0$). But, by unitarity, $\mathcal{P}_{+}(\omega, E) = 1 - \mathcal{P}_{-}(\omega, E)$, and after a straightforward calculation of the reflection coefficient $\mathcal{P}_{-}(\omega, E)$, one finds

$$\mathcal{P}_{+}(\omega, E) = 1 - \left(\frac{\lambda_0}{\omega}\right)^4 \left| \int_{-\infty}^{\infty} dx (\partial_x w_2(x))^2 e^{2ikx} \right|^2 + o(\omega^{-4}). \quad (5.37)$$

6. Concluding remarks

We have proven that the scattering by a local time-periodic potential has well defined low and high frequency limits, and we have studied the first terms of the corresponding asymptotic expansions of scattering probabilities for suitably smooth potentials. All our considerations are non perturbative with respect to the potential strength. Inspection of the proofs of both limits shows that they will also apply to potentials with other types of time variations, not necessarily periodic, for instance potentials switched on and off in time.

The status of both expansions is not the same. The validity of the low frequency expansion requires differentiability of the potential in its time variable and a fast spatial decay (to have the n -th order term defined one needs to apply the Lemma of Section 3 with η sufficiently large, see [22]). On the other hand, as seen from Proposition 2, the high frequency limit will necessitates strong local differentiability properties of the potential with respect to its spatial variables.

Already at the lowest order, the corrections to the adiabatic limit have a complicated structure. Their explicit calculation requires in principle the full solutions of the static scattering problems for the potentials $v(x, \alpha)$, and this complexity increases considerably for higher order terms. One can however emphasize an interesting point: for smooth potentials of the form (1.1) and (1.2), the first non vanishing correction to scattering probabilities at low and high frequency are of order ω^2 and ω^{-2} respectively (see Section 3 and part (ii) of Proposition 2). Thus, scattering with these types of interactions has a certain stability with respect to dynamical perturbations. In particular, a potential with oscillating coupling and zero average is essentially transparent in the high frequency regime (see (5.37)).

A number of questions deserve further investigations. We mention some of them. The first correction terms can be worked out in more detail in specific cases: for instance if the static potential has a resonance, how stable is the resonance under slow oscillation of the potential and what is the nature of the energy transfer with the external field? We have not established here the high frequency expansion beyond the ω^{-2} term of Proposition 2,(ii). In particular, one expect the sideband probabilities to be very small for sufficiently smooth potentials. They have been shown to be $o(\omega^{-2})$, but what is their asymptotic behavior?

Also, interesting comparisons with the corresponding classical scattering problems could be made in a semi-classical regime. In the case when the potential has local singularities (square potential barrier, Coulomb potential), what is the behavior of the correction to the high frequency limit? For instance, we have checked that for a perturbation by a modulated δ -function, the corrections are $O(1/\sqrt{\omega})$ only.

Finally, in this paper, we have only used the time-dependent formulation of scattering theory. How to recover the results in the quasistationary formalism [14] is an open problem. We plan to come back to these questions in future work.

Appendix A

According to Lemma 3 of [22],

$$\| \langle q \rangle^{-\eta} (H + \mu)^{-1} \langle q \rangle^{\eta} \| < \infty, \quad \| \langle q \rangle^{-\eta} p_j (H + \mu)^{-1} \langle q \rangle^{\eta} \| < \infty. \quad (\text{A.1})$$

To prove part (ii) of Proposition 2, we also need the result

$$\| \langle q \rangle^{-\eta} p^n (H + \mu)^{-n} \langle q \rangle^{\eta} \| < \infty, \quad (\text{A.2})$$

where $p^n = p_{j_1} \cdots p_{j_n}$ and n is a given integer. We shall prove (A.2) by a recursion procedure. We assume it is true up to n and have to show it for $n + 1$. To simplify the notation we write $p \equiv p_j$ for all $j = 1, \dots, d$ without distinction between the different components of p . We have,

$$p^{n+1} (H + \mu)^{-(n+1)} = p (H + \mu)^{-1} p^n (H + \mu)^{-n} + p [p^n, (H + \mu)^{-1}] (H + \mu)^{-n}. \quad (\text{A.3})$$

The first term of (A.3) is bounded by assumption. For the second term we observe that

$$[p^n, (H + \mu)^{-1}] = (H + \mu)^{-1} [H, p^n] (H + \mu)^{-1} = (H + \mu)^{-1} [V, p^n] (H + \mu)^{-1}. \quad (\text{A.4})$$

Inserting

$$[p^n, V] = \sum_{j=1}^n \binom{n}{j} (-1)^j \partial_x^j V p^{n-j} \quad (\text{A.5})$$

in (A.4), then using (A.1), one finds that the second term of (A.3) is also bounded, provided that all the partial derivatives $\partial_x^j V$, $j = 1, \dots, n$, satisfy (3.1). Thus, (A.2) is true for $n + 1$.

References

- [1] A. K. Kazanskii, V. N. Ostrovskii, E. A. Solov'ev: *Sov. Phys.-JETP*, **43**, 254 (1976).
- [2] M. Büttiker, R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 1739 (1982).
- [3] A. Douglas Stone, M. Ya. Azbel, P. A. Lee, *Phys. Rev. B*, **31**, 1707 (1985).
- [4] E. H. Hauge, J.A. Støvneng, *J. Stat. Phys.*, **57**, 841 (1989).
- [5] A. Pimpale, S. Holloway, R. J. Smith, *J. Phys. A*, **24**, 3533 (1991).
- [6] A. Pimpale, M. Razavy, *Fortschr. Phys.*, **39**, 885 (1991).
- [7] W. C. Henneberger, *Phys. Rev. Lett.*, **21**, 838 (1968).
- [8] "Atoms in Intense Laser Fields, edited by M. Gavrilá", edited by M. Gavrilá, Academic, New York (1992).
- [9] M. Gavrilá, J. Z. Kaminski, *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 6139 (1984).
- [10] S. Holloway: "Interactions of Atoms and Molecules with Solid Surfaces" edited by V. Bortolani, N. H. March, M. P. Tosi, New York: Plenum (1990), p.567.
- [11] J. D. Dollard, *J. Math. Phys.*, **7**, 802 (1966).
- [12] B. K. Yajima, *J. Math. Soc. Japan*, **29**, 729 (1977).
- [13] J. S. Howland, *Indiana Univ. Math. J.*, **28**, 471 (1979).
- [14] D. R. Yafaev, "Recent Developments in Quantum Mechanics", edited by A. Boutet de Monvel et al., Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 367 (1991).
- [15] D. R. Yafaev, *Proc. Steklov Inst. of Math.*, **2** (V.159), 219 (1984).
- [16] H. Neidhart, *Integr. Eq. Oper. Th.*, **15**, 100 (1992).
- [17] F. Gesztesy, H. Mitter, M. Perush, *J. Math. Anal. Appl.*, **110**, 265 (1985).
- [18] M. Reed, B. Simon, "Scattering Theory", Academic Press, New-York, (1979).
- [19] J. Rayski, J. M. Rayski, Jr., "The Uncertainty Principle and Foundations of Quantum Mechanics", edited by W. C. Price and S. S. Chissick, Wiley, (1977).
- [20] H. Narnhofer, W. Thirring, *Phys. Rev. A*, **26**, 3646 (1982).
- [21] D. Sokolovski, P. Hänggi, *Europhys. Lett.*, **1**, 7 (1988).
- [22] A. Martinez, S. Nakamura, *C. R. Acad. Sci. Paris*, **318**, Série II, 1153 (1994).
- [23] W. Amrein, M. B. Cibils, K. B. Sinha, *Ann. Inst. Poincaré*, **47**, 367 (1987).
- [24] J. Levitan, Z. Suchanecki, *Phys. Rev. A*, **50**, 2761 (1994).
- [25] W. Amrein, "Non-Relativistic Quantum Dynamics", *Math. Phys. Studies*, Vol. 2, Reidel, Dordrecht (1981).
- [26] B. A. van Tiggelen, A. Tip, A. Lagendijk, *J. Phys. A*, **26**, 1731 (1993).

Conclusion et commentaires

La plupart des articles présentés dans cette thèse comportent déjà des conclusions indépendantes. Sans vouloir ici paraphraser ces dernières, nous allons plutôt rappeler quelques points importants du travail et essayer d'ouvrir des perspectives sur des développements éventuels.

Une partie importante de la thèse concerne le concept de temps de retard qui a été généralisé essentiellement dans trois directions. Tout d'abord, en caractérisant son domaine de validité, pour ce qui est du rôle joué par les régions de localisation. Ensuite, en considérant des conditions arbitraires d'observation de la particule diffusée. Enfin, en montrant que le concept continue à faire sens lorsque le potentiel dépend du temps.

Chacune de ces trois généralisations met l'accent sur le rôle joué par le temps de référence dans la définition du temps de retard. Dans la première, on montre que seules les régions à symétrie sphérique sont admissibles et que le choix de leur centre n'est pas innocent. Dans la deuxième, on apprend que le choix d'un temps de référence associé à la trajectoire libre sortante (plutôt qu'entrante) est crucial pour la définition du temps de retard conditionnel. Dans la troisième, qui considère la définition du temps de retard global pour des potentiels dépendant du temps, on doit par contre faire intervenir un temps de référence mixte, associé à la fois aux trajectoires libres entrantes et sortantes.

Il est alors naturel de se demander s'il est possible d'écrire une définition pour le temps de retard qui considère à la fois la possibilité d'observer la particule sortante dans un certain sous-espace $F\mathcal{H}$ de l'espace de Hilbert (spécifié par un projecteur F compatible avec l'évolution libre) et le fait que l'interaction puisse aussi varier au cours du temps. Pour cela, il suffit de remarquer que, en définitive, le temps de retard n'est rien d'autre que ce qui reste du temps de séjour une fois soustraite sa contribution libre, qui diverge linéairement avec le rayon r de la boule de localisation. Il suit que la définition la plus générale possible pour un temps de retard conditionnel, qui garde aussi son sens si le potentiel dépend explicitement du temps, est exprimée par la limite

$$\tau_{\varphi}^F(c) \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} \{T[b_r(c)/F] - r \partial_r T[b_r(c)/F]\}, \quad (1)$$

avec $T[b_r(c)/F]$ qui est le temps de séjour conditionnel [II,(1.11)].

Dans la définition du concept de temps de retard conditionnel, un point important a été celui de mettre en évidence l'impossibilité d'une définition non-ambiguë pour le temps de séjour conditionnel en mécanique quantique. Nous avons en effet montré qu'un tel concept repose sur une question jointe sur deux propriétés incompatibles. D'autre part, dans la célèbre controverse sur la durée de l'effet tunnel (tunneling time problem), on pose précisément une question sur un temps de séjour conditionnel, associé à la transmission. Il s'agit donc d'un problème mal posé en mécanique quantique, du moins tant que l'on reste dans le cadre de son interprétation standard.

Donc, si l'on veut à tout prix dire encore quelque chose d'intelligent sur ce problème, il n'y a plus que deux chemins possibles à parcourir. Pour le premier, il faut être un grand expert des fondements de la mécanique quantique, et proposer une nouvelle théorie qui dépasse les problèmes conceptuels liés aux relations d'incertitude de Heisenberg. Les enjeux dépassent alors, bien entendu, le stricte cadre du problème posé dans la controverse sur la durée de l'effet tunnel (voir par exemple [AV] et [S]). Le deuxième est plus modeste. Il se limite à remarquer que la question du temps de séjour conditionnel ne fait pas de sens en mécanique quantique, et qu'il faut tout simplement la remplacer par une question sur le temps de retard, comme nous l'avons fait au chapitre II.

Reste cependant un petit malaise. Pourquoi tant de chercheurs, souvent très proches d'une physique appliquée, attachent tant d'importance à la question du temps de séjour? Ce fait est à priori d'autant plus surprenant que le temps de retard et le temps de séjour sont deux concepts qui, du moins pour un potentiel à support compact, sont classiquement équivalents. Pour mieux comprendre ce point, il faut revenir à l'article de Büttiker et Landauer [BL] qui, certainement, est celui qui a le plus enflammé la controverse. Une lecture attentive de ce travail montre que ces auteurs sont plutôt à la recherche de ce qu'on pourrait appeler, en termes vagues, un temps caractéristique associé à la transmission. Non pas dans le sens précis du temps effectivement passé par la particule dans la région d'interaction (même si, un peu maladroitement, les auteurs l'appellent temps de traversée), mais plutôt dans le sens d'un temps d'interaction de la particule avec un degré de liberté dynamique additionnel. Vue sous cette optique là, la question est très différente de celle qui est habituellement posée, et la controverse sur le "tunneling time" se révèle être, à notre sens, surtout d'ordre sémantique.

Cela nous amène tout naturellement à la dernière partie de la thèse où, justement, dans le dernier chapitre, il était question de l'étude de deux régimes particulièrement importants dans le problème de la diffusion par un potentiel périodique en temps: les régimes de basse et de haute fréquence. En particulier, nous avons réussi à montrer que, pour une large classe de potentiels, on a les comportements (par exemple pour la

probabilité de transmission),

$$\mathcal{P}_E(\omega) = \mathcal{P}_E^{\text{ad}} + (\omega\tau_E^{\text{ad}})^2 + o(\omega^2) \quad (2)$$

pour $\omega \rightarrow 0$, et

$$\mathcal{P}_E(\omega) = \mathcal{P}_E^{\text{hf}} + (\omega\tau_E^{\text{hf}})^{-2} + o(\omega^{-2}) \quad (3)$$

pour $\omega \rightarrow \infty$. Les corrections (2) et (3) à ces deux régimes définissent, bien entendu, deux temps d'interaction τ_E^{ad} et τ_E^{hf} . Ces temps sont en général très compliqués, surtout parce que la dépendance temporelle du potentiel n'est pas traitée ici de manière perturbative.

Une autre manière de procéder, plus proche de l'optique originale de Büttiker et Landauer, consiste à traiter la partie de l'interaction qui dépend explicitement du temps seulement de manière perturbative, mais d'étudier ensuite les variations de la probabilité $\mathcal{P}_E(\omega)$ pour toutes les valeurs possibles de la fréquence ω . Cet aspect n'a pas été étudié dans ce travail, mais nous pensons que les méthodes dépendantes du temps que nous avons développées au chapitre X soient particulièrement bien adaptées pour mener à bien une telle étude. En particulier, nous pensons qu'il soit possible de généraliser le calcul de Büttiker-Landauer pour la barrière opaque, et de tester dans un cadre élargi l'idée de l'existence d'une (ou plusieurs) fréquences de "cross-over" pour de tels processus.

Concernant la limite de haute fréquence, un point mérite attention. Si l'on parcourt la preuve de la Proposition 2 du chapitre X, il est facile de se convaincre que rien ne s'oppose à poursuivre le développement de l'opérateur de diffusion en puissances inverses de ω , si le potentiel est infiniment différentiable. Il est aussi facile de se convaincre que les corrections ainsi obtenues concernent seulement la composante élastique de l'opérateur de diffusion. La conclusion est que dans la limite $\omega \rightarrow \infty$, les contributions inélastiques au processus de diffusion décroissent plus vite que toute puissance inverse de ω . Ce résultat mérite une investigation plus approfondie. Il laisse en effet sous-entendre qu'il existerait pour les "sidebands" quelque chose comme une loi de décroissance exponentielle, ce qui constituerait un résultat de nature complémentaire au théorème adiabatique habituel de la mécanique quantique.

Nous terminons cette discussion par quelques mots sur le théorème de Levinson. La dérivation présentée dans la deuxième partie de la thèse est essentiellement limitée au stricte cadre des modèles unidimensionnels. Il serait intéressant de comprendre sa généralisation au cadre plus général d'un potentiel à trois dimensions d'espace sans l'hypothèse de la symétrie sphérique. Plus intéressante encore est, à notre avis, la dérivation du théorème au chapitre IX, pour des potentiels périodiques en temps. Ce résultat, bien que mathématiquement très plausible, nécessite une étude plus approfondie. En particulier, des questions comme l'appartenance de l'opérateur de Eisenbud-Wigner à la classe des opérateurs traçables, la continuité des amplitudes de diffusion aux points exceptionnels où l'énergie incidente est un multiple entier de la fréquence, et leur com-

portement à basse et haute énergie, restent encore, du point de vue mathématique, mal comprises.

Enfin, le fait même que l'on puisse écrire un théorème de Levinson pour des potentiels périodiques, nous ramène tout naturellement à la question de l'existence d'états liés (cycliques) pour de telles interactions. La conjecture généralement admise est que ces états n'existent pas pour des potentiels décroissant à l'infini. Nous pensons par contre que, bien qu'instables sous des petites perturbations, ces états ont bien des chances d'exister, et que le mécanisme physique qui leur serait associé est la possibilité d'obtenir, avec un potentiel dépendant du temps, une réflexion totale élastique à énergie non-nulle (ce qui est impossible pour une interaction statique) [KOS]. Voici une question ouverte, bien excitante, que nous jugeons parfaite pour mettre une fin à cette conclusion.

Références

- [A] G. R. Allcock, *Ann. of Phys.* **53**, (1969), p. 253.
- [AC] W. O. Amrein et M. B. Cibils, *Helv. Phys. Acta*, **60**, (1987), p. 481.
- [ACS] W. Amrein, M. B. Cibils et K. B. Sinha, *Ann. Inst. Poincaré*, **47**, (1987), p. 367.
- [AG] W. O. Amrein et V. Georgescu, *Helv. Phys. Acta*, **46**, (1973), p. 635.
- [AJS] W. O. Amrein, J. M. Jauch et K. B. Sinha, "Scattering Theory in Quantum Mechanics", Benjamin, Reading (1977).
- [AM] I. Antoniou et B. Misra, *Int. J. Theor. Phys.*, **31**, (1991), p. 11.
- [AV] Y. Aharonov et L. Vaidman, *Phys. Rev. A*, **41**, (1990), p. 119.
- [BSM] S. Brouard, R. Sala et J. G. Muga, *Europhys. Lett.*, **22**, (1993), p. 159.
- [CLB] C. Collins, D. Lowe et J. R. Barker, *J. Phys. C*, **20**, (1987), p. 6213.
- [D] E. B. Davies, *Comm. Helv. Phys. Acta*, **48**, (1975), p. 365.
- [E] L. Eisenbud, Dissertation, Princeton University, (1948), non publié.
- [EV] V. Enss et K. Veselić, *Ann. Inst. Henri Poincaré*, **2**, (1983), p. 159.
- [H] J. S. Howland, *Indiana Univ. Math. J.*, **28**, (1979), p. 471.
- [HS] E. H. Hauge et J. A. Støvneng, *Rev. Mod. Phys.*, **61**, (1989), p. 917.
- [Jau1] J. M. Jauch, *Helv. Phys. Acta*, **31**, (1958), p. 127 et p. 661.
- [Jau2] J. M. Jauch, *Helv. Phys. Acta*, **30**, (1957), p. 143.
- [Jaw] W. Jaworski, *J. Math. Phys.*, **30**, (1989), p. 1505.
- [Je] A. Jensen, *Comm. Math. Phys.*, **82**, (1981), p. 435.
- [Ka] T. Kato, *Perturbation Theory for Linear Operators*, Springer-Verlag, Berlin (1976).
- [Ko] A. Kolmogorov, "Grundbegriffe der Wahrscheinlichkeitsrechnung", Springer, Berlin (1933).
- [KFT] K. Kong Wan, R. H. Fountain et Z. Y. Tao, *J. Phys. A*, **28**, (1995), p. 2379.
- [KOS] A. K. Kazanskii, V. N. Ostrovskii, E. A. Solov'ev, *Sov. Phys.-JETP*, **43**, (1976), p. 254.
- [L] R. Lavine, *J. Funct. Anal.* **12**, (1973), p. 30.
- [LM] R. Landauer et Th. Martin, *Rev. Mod. Phys.*, **66**, (1994), p. 217.
- [Ma1] Ph. A. Martin, *Acta Phys. Austriaca, Suppl.* **23**, (1981), p. 159.
- [Ma2] Ph. A. Martin, *Comm. Math. Phys.*, **47**, (1976), p. 221.
- [Ma3] Ph. A. Martin, *Nuovo Cimento*, **30B**, (1975), p. 217.

- [Mi] B. Misra, preprint, (1995).
- [N] J. von Neumann, "*Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*", Springer-Verlag, Berlin (1932).
- [P] C. Piron, "*Mécanique quantique*", Presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne (1990).
- [Ra] H. Rauch et al, Phys. Lett. A, **54**, (1975), p. 425.
- [Ru] D. Ruelle, Nuovo Cim., **59**, (1969), p. 655.
- [S] A. M. Steinberg, Phys. Rev. Lett., **74**, (1995), p. 2405.
- [SC] D. Sokolovski et J. N. L. Connor, Phys. Rev. A, **47**, (1993), p. 4677.
- [T] G. Temple, Nature, **135**, (1935), p. 957.
- [We] R. Werner, Ann. Inst. Henri Poincaré, **47**, (1987), p. 429.
- [Wi] E. p. Wigner, Phys. Rev. **98**, (1955), p. 145.
- [Y1] D. R. Yafaev, "*Recent Developments in Quantum Mechanics*", edited by A. Boutet de Monvel et al., Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 367 (1991).
- [Y2] D. R. Yafaev, "*Mathematical Scattering Theory*", Translations of Math. Monographs, V. 105, AMS, Providence, Rhode Island (1992).
- [YK] K. Yajima et H. Kitada, Ann. Inst. Henri Poincaré, **2**, (1983), p. 145.

Curriculum Vitae

Je suis né à Bologne, en Italie, le 19 octobre 1965, de Maria Luisa et Giovanni. En 1983 j'obtiens le diplôme de bachelier de l'enseignement du second degré, série maths et sciences de la nature, à l'Académie de Grenoble. Je m'inscris à la faculté des sciences de Lausanne la même année et j'obtiens le diplôme de physicien en 1989, après un travail effectué sous la direction du Prof. J.-J. Loeffel. Pris par un intérêt soudain pour les fondements de la mécanique quantique, je passe les deux années suivantes à Genève, au sein du groupe du Prof. C. Piron. Durant la même période, je me marie avec Gaby avec qui j'ai mon premier enfant, Federico. En 1992 je retourne à Lausanne, auprès du Prof. J.-J. Loeffel, et en 1993 je suis engagé à l'EPFL. Depuis lors, je suis assistant à l'institut de physique théorique de cette même école. Vers la fin 94, j'assiste à l'heureuse naissance de mon deuxième enfant, Luca.

Enseignement

- 89: assistant au cours "*Physique Théorique VI*" du Prof. J.-J. Loeffel.
- 90: assistant aux cours "*Physique Théorique I*" du Prof. C. Piron et "*Conformal Field Theories and Exactly Solvable Models*" (troisième cycle) du Prof. M. C. Gomez.
- 91: assistant au cours "*Répertoire de mathématique II*" des Profs. M. Guenin, W. O. Amrein, J. Imhof, H. Ruegg et C. Piron.
- 92: assistant au cours "*Physique Théorique III-IV*" du Prof. J.-J. Loeffel.
- 93: assistant aux cours "*Physique Quantique*" du Prof. A. Quattropani, "*Introduction aux problèmes à N-corps et champs quantiques*" (troisième cycle) du Prof. Ph. A. Martin et "*L'intégrale fonctionnelle et ses applications*" (troisième cycle) des Profs Ph. A. Martin, X. Zotos, C. Becchi et O. Piguet.
- 94: assistant au cours "*Physique Quantique*" du Prof. A. Quattropani;
- 95: assistant aux cours "*Physique Quantique*" du Prof. A. Quattropani et "*Introduction aux problèmes à N-corps et champs quantiques*" (troisième cycle) du Prof. Ph. A. Martin;

Publications

- [0] M. Sassoli de Bianchi, *Sur la notion de degré de dépendance aléatoire*, travail de diplôme UNIL, 1989.
- [1] Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *On the theory of the Larmor clock and time-delay*, J. Phys. A, **25**, 1992, pp. 3627-3647.
- [2] M. Sassoli de Bianchi et Ph. A. Martin, *On the definition of time-delay in scattering theory*, Helv. Phys. Acta **65**, 1992, pp. 1119-1126.
- [3] M. Sassoli de Bianchi, *Conditional time-delay in scattering theory*, Helv. Phys. Acta **66**, 1993, pp. 361-377.
- [4] M. Sassoli de Bianchi, *Levinson's theorem, zero-energy resonances, and time delay in one-dimensional scattering systems*, J. Math. Phys., **35**, 1994, pp. 2719-2733.
- [5] Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *Spin precession revisited*, Found. Phys., **24**, 1994, pp. 1371-1378.
- [6] M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura, *On the number of states bound by one-dimensional finite periodic potentials*, J. Math. Phys., **36**, 1995, pp. 1753-1764.
- [7] Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *On the low- and high-frequency limit of quantum scattering by time-dependent potentials*, J. Phys. A, **28**, 1995, pp. 2403-2427.
- [8] M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura, *Differential equations and factorization property for the one-dimensional Schrödinger equation with position-dependent mass*, à paraître dans Eur. J. Phys., 1995.
- [9] M. Sassoli de Bianchi et M. Di Ventura, *How many bound-states does a one-dimensional superlattice have?*, à paraître dans Superlattices and Microstructures, 1995.
- [10] Ph. A. Martin et M. Sassoli de Bianchi, *Levinson's theorem for time-periodic potentials*, preprint EPFL, 1995.

Comme Schopenhauer, je pense que ce qui pousse les hommes à s'occuper d'art ou de sciences, c'est essentiellement le désir d'échapper à la routine quotidienne, à sa douloureuse grossièreté, à sa désespérante tristesse, et à l'aliénation de nos désirs toujours changeants. C'est la marque d'une nature bien équilibrée que de vouloir s'évader hors de la vie personnelle, et d'aspirer au monde de la perception et de la pensée objective. Cette aspiration est en tout point comparable au désir qui pousse les citadins, pour échapper à l'emprise de leur environnement bruyant, à s'évader vers les cimes neigeuses, là où dans l'air pur et tranquille, le regard peut détailler à loisir les contours immobiles des sommets apparemment éternels.

Albert Einstein