Optimisation dans l'espace des propagateurs en contrôle quantique

Andreea Grigoriu, CEREMADE Université Paris Dauphine

Gabriel Turinici, CEREMADE Université Paris Dauphine

Le problème abordé dans cette étude est le contrôle par un champ laser $\varepsilon(t)$ [1, 5] d'un système de particules quantiques, qui évolue selon l'équation de Schrodinger:

$$i\frac{d}{dt}\psi(t) = H(t)\psi(t)$$

où $\psi(t)$ est la fonction d'onde et $H(t)$ l'Hamiltonien du système. On introduit aussi $U(t)$ solution de

$$i\frac{d}{dt}U(t) = H(t)U(t)$$

qui a la propriété $\psi(t) = U(t)\psi(0)$. Le but est de déterminer un champ laser $\varepsilon(t)$ optimal qui permette l'evolution de U de l'état initial $U(t = 0) = I$ à $U(t = T)$.
L'approximation dite "bilinéaire" consiste en la recherche de $H(t)$ sous la forme $H(t) = H_0 + \varepsilon(t)\mu$ où H_0 est l'Hamiltonien interne du système et μ le moment dipolaire qui couple le champ laser $\varepsilon(t)$ avec le système. Pour resoudre ce problème nous allons minimiser la fonctionnelle suivante:

$$J = \int_0^T \|H - \Pi_{H_0+Vect(\mu)}(H)\|^2,$$

sous les contraintes: $H(t) = i\dot{U}(t)U(t)^*$ et $U(t)^*U(t) = U(t)U(t)^* = I$, pour tout t appartenant à $[0, T]$. L'expression $\Pi_{H_0+Vect(\mu)}(H)$ représente la projection de l'Hamiltonien H sur l'espace $H_0 + Vect\{\mu\}$. Le coefficient de la projection, sur cet espace sera $\varepsilon(t)$.
Pour éliminer la deuxième contrainte nous allons chercher $U(t)$ de la forme $U(t) = \exp(i * A(t))$, avec $A(t)$ matrice hermitienne.
Pour déterminer les point critiques de J nous proposons de discrétiser l'intervalle $[0, T]$ en des points $t_j = jT/N$.Cette discrétisation en temps nous permet d'exprimer $\dot{U}(t)$ par une formule d'approximation. Nous allons déterminer le champ laser optimal avec l'aide de l'algorithme du gradient, le gradient $(\frac{\partial J}{\partial A_j})_{j=1,..N-1}$,$(A_j = A(t_j))$ est calculé par une procédure d'adjoint.
La procédure a été validée à travers des simulations numériques.

Références

[1] H. Rabitz, *Shaped Laser Pulses as Reagents* Science 24 January 2003 299: 525-527.

[2] H.Rabitz, M. M. Hsieh, Carey M., *Quantum Optimally Controlled Transition Landscapes*, Science 26 March 2004 303: 1998-2001.

[3] H.Rabitz, G. Turinici, *Quantum wavefunction controlability* , Chem.Phys., 267:1-9,2001.

[4] H.Rabitz, G. Turinici, *Wavefunction controlability in quantum systems*, J. Phys. A, 36:2565-2576,2003.

[5] W. S. Warren, H. Rabitz, M. Dahleh, *Coherent Control of Quantum Dynamics*,Science 12 March 1993 259: 1581-1589.

Andreea Grigoriu, CEREMADE Université Paris Dauphine, Place du Marechal De Lattre De Tassigny, 75016 Paris, France
grigoriu@ceremade.dauphine.fr