Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

Séance d'exercices 5 : évolution temporelle.

Exercice 1

Soit l'opérateur

$$\hat{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \hat{H}(t')dt'$$

alors sa dérivée temporelle est

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}(t)$$

On peut alors calculer le commutateur

$$\left[\frac{d\hat{A}}{dt}, \hat{A}\right] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}(t), \int_{t_0}^t \hat{H}(t')dt'\right] = -\frac{1}{\hbar^2}\int_{t_0}^t \left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right]dt = 0$$

car $\left[\hat{H}(t), \hat{H}(t')\right] = 0$.

Exercice 2

a)

Puisque $\hat{P}$ est un projecteur, on sait que $\hat{P}^2 = \hat{P}$ (idempotence) et $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$. On peut alors simplifier l'expression de l'exponentielle comme suit :

$$\begin{aligned}
e^{ix\hat{P}} &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(ix\hat{P})^k}{k!} \\
&= 1 + ix\hat{P} + \frac{(ix\hat{P})^2}{2!} + \frac{ix\hat{P})^3}{3!} + ... \\
&= 1 + \hat{P}\Big(ix + \frac{(ix)^2}{2!} + \frac{(ix)^3}{3|} + ...\Big) \\
&= 1 + \hat{P}\left(e^{ix} - 1\right)
\end{aligned}$$

Cet opérateur est unitaire, car

$$\left(e^{ix\hat{P}}\right)^\dagger e^{ix\hat{P}} = e^{-ix\hat{P}^\dagger}e^{ix\hat{P}} = e^{-ix\hat{P}}e^{ix\hat{P}} = 1$$

b)

En toute généralité, sii on cherche l'état du système après une évolution pendant un temps t, alors on sait que l'état sera donné par

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$$

où $\hat{U}(t)$ est l'opérateur d'évolution défini comme

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

Il existe deux méthodes différentes pour calculer cet état $|\psi(t)\rangle$. La première est de simplement appliquer l'opérateur initial à l'état. Le problème, c'est que comme l'Hamiltonien se trouve dans l'exponentielle, ce n'est pas toujours simple. Toutefois, dans cet exemple-ci, comme notre Hamiltonien est un projecteur, on peut utiliser la formule dérivée en a) et alors, il devient facile d'appliquer directement l'exponentielle de l'opérateur à l'état.
Ainsi, on peut simplifier l'expression de l'opérateur évolution :

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\hbar\omega|1\rangle\langle 1|t} = e^{-i\omega t\,|1\rangle\langle 1|} = 1 + |1\rangle\langle 1|\left(e^{-i\omega t} - 1\right)$$

et l'état final devient donc

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle &= \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \\
&= \Big(1 + |1\rangle\langle 1|\left(e^{-i\omega t} - 1\right)\Big)\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \\
&= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{e^{-i\omega t} - 1}{\sqrt{2}}\Big(|1\rangle\langle 1|0\rangle + |1\rangle\langle 1|1\rangle\Big) \\
&= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} + \frac{e^{-i\omega t} - 1}{\sqrt{2}}|1\rangle \\
&= \frac{|0\rangle + e^{-i\omega t}|1\rangle}{\sqrt{2}}
\end{aligned}$$

Comme je l'ai mentionné, cette méthode n'est utile que si l'opérateur d'évolution peut s'écrire sous une forme simplifiée. En toute généralité, ce n'est pas le cas et il faut donc utiliser une méthode différente pour calculer l'état final $|\psi(t)\rangle$. Cette méthode consiste à exprimer l'état en terme des vecteurs propres de l'Hamiltonien et ensuite d'appliquer l'opérateur évolution. En effet, si $|\lambda\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}$ avec pour valeur propre λ alors pour toute fonction de $\hat{H}$ appliquée à un de ses vecteur propre on aura

$$f(\hat{H})|\lambda\rangle = f(\lambda)|\lambda\rangle$$

Dans notre exercice,

$$\hat{H} = \hbar\omega|1\rangle\langle 1| = \hbar\omega\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Les vecteurs propres de l'Hamiltonien sont donc $|0\rangle$ et $|1\rangle$ avec pour valeur propre respectives $E_0 = 0$ et $E_1 = \hbar\omega$. Notre état est donc déjà exprimé en fonction des vecteurs propres. On peut alors calculer l'état final ainsi :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_0t/\hbar}|0\rangle + e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle + e^{-i\omega t}|1\rangle\right)$$

Ce qui est bien ce qu'on avait trouvé précédemment.

Exercice 3

On se souvient que le théorème d'Ehrenfest s'énonce de la façon suivante : la dérivée temporelle de la valeur moyenne d'un opérateur $\hat{A}$ est donnée par

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle$$

Ainsi, l'évolution temporelle de l'opérateur position est

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} &= \left\langle\frac{\partial\hat{x}}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle \\
&= 0 + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{x},\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\langle[\hat{x},\hat{p}^2]\rangle + \frac{m\omega^2}{2i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{x}^2]\rangle \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\langle[\hat{x},\hat{p}]\hat{p}+\hat{p}[\hat{x},\hat{p}]\rangle + 0 \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\langle 2i\hbar\hat{p}\rangle \\
&= \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}
\end{aligned}$$

et l'évolution temporelle de l'opérateur quantité de mouvement est

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} &= \left\langle\frac{\partial\hat{p}}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle \\
&= 0 + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{p},\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{2mi\hbar}\langle[\hat{p},\hat{p}^2]\rangle + \frac{m\omega^2}{2i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{x}^2]\rangle \\
&= 0 + \frac{m\omega^2}{2i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{x}]\hat{x}+\hat{x}[\hat{p},\hat{x}]\rangle \\
&= \frac{m\omega^2}{2i\hbar}\langle -2i\hbar\hat{x}\rangle \\
&= -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle
\end{aligned}$$

Exercice 4

a)

Comme on l'a vu à l'exercice 2, pour trouver l'évolution temporelle d'un état quelconque, il est plus simple d'écrire cet état en fonction des états propres du système, car l'évolution temporelle des vecteurs propres est simple à calculer. Diagonalisons donc l'hamiltonien pour trouver ses vecteurs propres.
Les valeurs propres sont les solutions de l'équation $\det(\hat{H}-\lambda I)=0$:

$$\begin{aligned}
& \det(\hat{H}-\lambda I) = 0 \\
\Leftrightarrow\ & (1-\lambda)^2 - X^2 = 0 \\
\Leftrightarrow\ & \lambda^2 - 2\lambda + (1-X^2) = 0 \\
\Leftrightarrow\ & \lambda_\pm = \frac{2\pm\sqrt{4-4(1-X^2)}}{2} \\
\Leftrightarrow\ & \lambda_\pm = 1 \pm |X|
\end{aligned}$$

Sans perte de généralité, supposons que X est positif, on a alors les deux valeurs propres suivantes :

$$E_+ = 1+X \qquad \text{et} \qquad E_- = 1-X$$

On trouve les vecteurs propres en se souvenant que $H|\psi_\pm\rangle = E_\pm|\psi_\pm\rangle$:

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \qquad \text{et} \qquad |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

On peut maintenant réécrire l'état initial $|\psi_1\rangle$ comme une combinaison linéaire des états propres

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_-\rangle$$

Puisque l'évolution temporelle d'un état propre est définie comme $|\lambda(t)\rangle = e^{-i\lambda t/\hbar}|\lambda\rangle$, on trouve facilement l'évolution temporelle de $|\psi_1\rangle$

$$\begin{aligned}
|\psi_1(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_+t/\hbar}|\psi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_-t/\hbar}|\psi_-\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i(1+X)t/\hbar}|\psi_+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i(1-X)t/\hbar}|\psi_-\rangle \\
&= \frac{e^{-it/\hbar}}{\sqrt{2}}\Big(e^{-iXt/\hbar}|\psi_+\rangle + e^{iXt/\hbar}|\psi_-\rangle\Big) \\
&= \frac{e^{-it/\hbar}}{\sqrt{2}}\Big(e^{-iXt/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + e^{iXt/\hbar}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\Big) \\
&= \frac{e^{-it/\hbar}}{2}\begin{pmatrix}e^{-iXt/\hbar} + e^{iXt/\hbar}\\ e^{-iXt/\hbar} - e^{iXt/\hbar}\end{pmatrix} \\
&= e^{-it/\hbar}\begin{pmatrix}\cos(Xt/\hbar)\\ -i\sin(Xt/\hbar)\end{pmatrix}
\end{aligned}$$

b)

Après un temps t, le système est dans l'état

$$|\psi_1(t = \pi\hbar/2X)\rangle = e^{-\frac{i\pi}{2X}}\begin{pmatrix}0\\-i\end{pmatrix} = e^{-\frac{i\pi}{2X}-\frac{i\pi}{2}}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = e^{-\frac{i\pi}{2X}-\frac{i\pi}{2}}|\psi_2\rangle$$

Et donc, la probabilité de se trouver dans l'état $|\psi_2\rangle$ est

$$P\big(|\psi_1(t)\rangle = |\psi_2\rangle\big) = |\langle\psi_1(t)|\psi_2\rangle|^2 = |e^{-\frac{i\pi}{2X}-\frac{i\pi}{2}}|^2|\langle\psi_2|\psi_2\rangle|^2 = 1$$

c)

$$|\psi_1(\tau = t/N)\rangle = e^{-\frac{i\pi}{2XN}}\begin{pmatrix}\cos(\frac{\pi}{2N})\\ -i\sin(\frac{\pi}{2N})\end{pmatrix} \approx e^{-\frac{i\pi}{2X}}\begin{pmatrix}1-\frac{1}{2}(\frac{\pi}{2N})^2\\ -i(\frac{\pi}{2N})\end{pmatrix} \quad \to \quad \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$

quand $N \to \infty$.
Donc le système retourne dans son état initial avec une probabilité

$$P\big(|\psi_1(\tau)\rangle = |\psi_1\rangle\big) = |\langle\psi_1(\tau)|\psi_1\rangle|^2 \approx \Big|e^{-\frac{i\pi}{2XN}}\Big|^2\Big(1-\frac{1}{2}\Big(\frac{\pi}{2N}\Big)^2\Big)^2 \approx 1-\Big(\frac{\pi}{2N}\Big)^2$$

d)

Si l'on répète cette procédure N fois, toujours conditionnellement à avoir mesurer le système dans l'état initial, alors la probabilité totale que le système se trouve dans l'état initial après un temps t sera

$$P\big(|\psi_1(t)\rangle = |\psi_1\rangle\big) = \left(1-\Big(\frac{\pi}{2N}\Big)^2\right)^N = 1-N\Big(\frac{\pi}{2N}\Big)^2 \to 1$$

quand $N \to \infty$.
On remarque donc que si on coupe l'évolution temporelle en mesurant fréquemment le système, alors on bloque l'évolution et le système restera dans son état initial alors que si on le laisse évoluer d'un seul coup pendant un temps t, puis on mesure à la fin, alors le système se trouvera dans l'état 2. C'est ce qu'on appelle l'effet Zéno.

Exercice 5

a)

Puisque $\rho(\mathbf{r},t) = \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$,

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\big(\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\big)\\ &= \frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) + \psi^*(\mathbf{r},t)\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\end{aligned}$$

Pour trouver les dérivées de ψ, utilisons l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t) \qquad \Leftrightarrow \qquad -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(\mathbf{r},t) = \hat{H}\psi^*(\mathbf{r},t)$$

où on a utilisé le fait que $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ pour calculer le dager de l'équation de Schrödinger. On peut maintenant remplacer dans notre dérivée initiale de $\rho(\mathbf{r},t)$ en utilisant également le fait que $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t}\big(\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\big)\\ &= \frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},t)}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) + \psi^*(\mathbf{r},t)\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}\\ &= \frac{i}{\hbar}\Big(\hat{H}\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)\psi(\mathbf{r},t) - \frac{i}{\hbar}\psi^*(\mathbf{r},t)\Big(\hat{H}\psi(\mathbf{r},t)\Big)\\ &= \frac{i}{\hbar}\Big(\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\big)\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)\psi(\mathbf{r},t) - \frac{i}{\hbar}\psi^*(\mathbf{r},t)\Big(\big(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\big)\psi(\mathbf{r},t)\Big)\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\Big(-\psi(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi^*(\mathbf{r},t) + \psi^*(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi(\mathbf{r},t)\Big) + \frac{i}{\hbar}\Big(V\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) - V\psi(\mathbf{r},t)\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) - \psi(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi^*(\mathbf{r},t)\Big) + 0\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\Big(\psi^*(\mathbf{r},t)\Delta\psi(\mathbf{r},t) - \psi(\mathbf{r},t)\Delta\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)\end{aligned}$$

b)

Remarquons que

$$\begin{aligned}
\nabla\Big(\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)-\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)\Big) &= \nabla\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)+\psi(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi^*(\mathbf{r},t)-\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t) \\
&\quad -\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) \\
&= \psi(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi^*(\mathbf{r},t)-\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) \\
&= -\frac{2m}{i\hbar}\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}
\end{aligned}$$

ou encore

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}=-\frac{i\hbar}{2m}\nabla\Big(\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)-\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)\Big)=-\nabla\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$$

avec

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2mi}\Big(\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)-\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)\Big)$$

et donc

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{J}(\mathbf{r},t)=0$$

c)

Posons

$$z=\frac{\hbar}{mi}\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)$$

alors, son complexe conjugué est

$$z^*=-\frac{\hbar}{mi}\psi(\mathbf{r},t)\nabla\psi^*(\mathbf{r},t)$$

et on peut réécrire le vecteur J comme

$$\begin{aligned}
J &= \frac{1}{2}(z+z^*) \\
&= \mathcal{R}e(z) \\
&= \mathcal{R}e\Big(\frac{\hbar}{mi}\psi^*(\mathbf{r},t)\nabla\psi(\mathbf{r},t)\Big) \\
&= \mathcal{R}e\Big(\frac{1}{m}\psi^*(\mathbf{r},t)\hat{P}\psi(\mathbf{r},t)\Big) \\
&= \mathcal{R}e\Big(\psi^*(\mathbf{r},t)\,\hat{v}\,\psi(\mathbf{r},t)\Big)
\end{aligned}$$

où $\hat{v}=\hat{P}/m$ est la vitesse. Cela nous rapproche donc du cas classique où $J=\vec{v}\cdot\rho$ avec ρ étant ici la densité de charge.