Mécanique Quantique 1 —– CORRIGÉ

Séance d'exercices 6 : évolution temporelle.

Exercice 1

Soit l'opérateur

$$\hat{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} \hat{H}(t')dt'$$

alors sa dérivée temporelle est

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

et on peut calculer le commutateur

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

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

Exercice 2

a)

Puisque $\hat{P}$ est un projecteur, $\hat{P}^2 = \hat{P}$ (idempotence) et $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$.

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

Cet opérateur est unitaire, car

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

b)

Si on cherche l'état du système après une évolution pendant un temps t, alors on sait que l'état sera $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$ où $\hat{U}(t)$ est l'opérateur d'évolution défini comme $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$. Ainsi, en utilisant la formule dérivée en a) on trouve

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

et l'état final est donc

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

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

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

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

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

Exercice 4

a)

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.

Exercice 5

a)

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 $\det(\hat{H}-\lambda I)=0$:

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

Sans perte de généralité, supposons que X est positif, on a alors les deux valeurs propres suivantes : $E_+ = 1+X$ et$E_- = 1-X$. 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 $|\psi(t)\rangle = e^{-iEt/\hbar}|\psi\rangle$, 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)

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

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

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

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.