Examen de Physique Quantique I

Octobre 2019
Phelma PNS 2A / C. Winkelmann

Éléments de dynamique quantique avancée : Opérateur d'évolution, mécanique matricielle de Heisenberg, propagateur

- On note $\mathcal{H}$ l'espace de Hilbert des vecteurs d'état du système.
- $\mathbb{I}$ en est l'opérateur identité.
- On définit l'exponentielle d'un opérateur A

$$\exp(A) = e^A = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{A^n}{n!}.$$

Cette fonction d'opérateur a certaines propriétés de la fonction exponentielle. Si $|\psi\rangle$ est vecteur propre de A, de valeur propre a, alors $e^A|\psi\rangle = e^a|\psi\rangle$.

De plus, si A et B commutent, alors

$$e^A\, e^B = e^{A+B}.$$

Si $[A, B] = 0$ alors $\left[e^A, B\right] = 0$. Enfin, pour $t \in \mathbb{R}$

$$\frac{d\, e^{tA}}{dt} = A\, e^{tA}.$$

1 Opérateur d'évolution

On considère un vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ de $\mathcal{H}$, qui est solution de l'équation de Schrödinger

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}, \tag{1}$$

où $H(t)$ est l'opérateur hamiltonien, qui peut a priori dépendre explicitement du temps. Nous nous intéresserons plus en détail aux propriétés de l'opérateur $U(t, t_0)$ de $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ qui transforme $|\psi(t_0)\rangle$ en $|\psi(t)\rangle$, donc tel que pour tout couple t, t_0

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\, |\psi(t_0)\rangle. \tag{2}$$

Cet opérateur est appelé *l'opérateur d'évolution* : sa connaissance permet de déterminer simplement $|\psi(t)\rangle$ à tout instant, connaissant sa valeur à l'instant initial t_0.

1.1

Montrez que la norme d'un vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ solution de Eq. (1) - ou de manière équivalente $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$ - ne dépend pas de t. Commentez ce résultat. Qu'en peut-on déduire pour $U^\dagger(t,t_0)\,U(t,t_0)$? U est-il hermitien ?

1.2

Réécrivez l'Eq. de Schrödinger (1) comme une équation différentielle sur l'opérateur $U(t,t_0)$ et justifiez que

$$U(t,t_0) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,U(t',t_0)dt'.$$

1.3

Montrez que pour trois temps t_0, t_1 et t_2 quelconques, on a

$$U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)\,U(t_1,t_0).$$

Commentez.

1.4

Montrez que $U(t_1,t_2) = U(t_2,t_1)^{-1}$ et commentez.

1.5

On appelle $U(t+dt,t)$ l'opérateur d'évolution infinitésimal.

Montrez que $U(t+dt,t) = \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}H(t)dt$.

1.6

Supposons que l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps : $H(t) = H_0$. A partir de la question 1.2, montrez que dans ce cas $U(t,t_0) = e^{-i(t-t_0)H_0/\hbar}$.

1.7

Justifiez (par exemple à l'aide d'un exemple) pourquoi lorsque H dépend explicitement du temps, l'opérateur d'évolution *ne peut pas* en général s'écrire sous la forme $e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt'}$.

2 Point de vue de Heisenberg

Dans le point de vue, dit de Schrödinger, développé en cours, la dynamique du système est encodée dans la fonction d'onde et les opérateurs sont constants (sauf dépendance temporelle explicite). Il existe un autre point de vue, celui dit de Heisenberg, ou c'est le contraire.

2.1

Supposons H indépendant du temps. Soit $\langle A\rangle(t)$ la moyenne quantique de l'observable A (opérateur sans dépendance explicite du temps) à l'instant t, moyennée sur l'état quantique $|\psi(t)\rangle$.

Montrez que

$$\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t_0)|\, A_H(t)\, |\psi(t_0)\rangle. \tag{3}$$

où

$$A_H(t) = U^\dagger(t,t_0)\, A\, U(t,t_0).$$

Ceci est le point de vue de Heisenberg, qui consiste à considérer que la dynamique est comprise dans les opérateurs et non dans les fonctions d'état. Concluez sur l'équivalence des deux points de vue. Dorénavant, l'indice H sous un opérateur signifie qu'il est pris dans le point de vue de Heisenberg et multiplié par $U^\dagger$ (à gauche) et U (à droite), comme ci-dessus.

2.2

H est toujours indépendant du temps. Montrez que si A commute avec H, alors $A_H = A$. Commentez.

2.3

Supposons désormais que A et H peuvent dépendre explicitement du temps et ne commutent pas forcément. Montrez que

$$\frac{dA_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[A_H(t), H_H(t)\right] + \left(\frac{dA(t)}{dt}\right)_H$$

2.4

Soient X et P les opérateurs position et impulsion (1D pour simplifier) dans le point de vue de Schrödinger, et $H = P^2/2m + V(X)$ l'hamiltonien. Montrez que $[X_H, P_H] = i\hbar\,\mathbb{I}$. Calculez dX_H/dt et dP_H/dt. Commentez.

3 Propagateur

Soit $|\psi(t)\rangle$ la fonction d'onde d'un système quantique et $\psi(\mathbf{r},t) \in \mathbb{C}$ sa valeur à la position $\mathbf{r}$. On note $|\mathbf{r}_1\rangle$ la fonction d'onde entièrement localisée au point $\mathbf{r}_1$; c'est donc une fonction de Dirac $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)$.

En électromagnétisme, le principe de Huygens stipule que la valeur du champ en un point $\mathbf{r}_2$ et à un instant t_2 donnés peuvent être calculés comme le résultat de la progagation du champ depuis toutes les positions de l'espace et à un instant antérieur $t_1 < t_2$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_2,t_2) = \int d^3\mathbf{r}_1\, K(\mathbf{r}_2,t_2,\mathbf{r}_1,t_1)\, \mathbf{E}(\mathbf{r}_1,t_1).$$

La fonction K s'appelle le *propagateur* du champ. De manière analogue, dans cette partie, nous allons chercher à décrire le propagateur de la fonction d'onde quantique.

3.1

Justifiez la notation $\psi(\mathbf{r}_1, t) = \langle \mathbf{r}_1 | \psi(t) \rangle$.

3.2

Supposons une base finie $\{|\varphi_n\rangle\}$ de $\mathcal{H}$. Justifiez la relation, dite de fermeture,

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = \mathbb{I}.$$

On admettra que les $\{|\mathbf{r}_1\rangle\}$ forment aussi une base (continue) de l'espace des fonctions d'onde, et qu'à ce titre on a

$$\int d^3\mathbf{r}_1 \, |\mathbf{r}_1\rangle\langle\mathbf{r}_1| = \mathbb{I}.$$

3.3

Utilisez cette relation pour démontrer

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \int d^3\mathbf{r}_1 \, \langle \mathbf{r}_2 | U(t_2, t_1) | \mathbf{r}_1 \rangle \, \psi(\mathbf{r}_1, t_1)$$

et identifiez formellement le propagateur K de l'équation de Schrödinger, par analogie avec le principe de Huygens. La causalité impose qu'on ne peut propager que "vers l'avenir". Pour en tenir compte nous multiplierons le propagateur par une fonction "marche", $\theta(t_2 - t_1)$.

3.4

(Question plus difficile, à garder pour la fin) Supposons H indépendant du temps et notons $E_n = \hbar\omega_n$ et $|\varphi_n\rangle$ ses valeurs/vecteurs d'onde propres. En partant des résultats de la question 1.6 et 3.2, montrez que dans ce cas l'expression du propagateur devient

$$K(\mathbf{r}_2, t_2, \mathbf{r}_1, t_1) = \theta(t_2 - t_1) \sum_n \varphi_n^*(\mathbf{r}_1) \varphi_n(\mathbf{r}_2) \, e^{-i\omega_n (t_2 - t_1)}$$