Chapitre III : Dynamique des systèmes quantiques

I) Equation de Schrödinger

Rôle du temps en physique quantique. Relation d'incertitude temps-énergie

II) Théorême d'Ehrenfest

Evolution des valeurs moyennes des observables. Application aux opérateurs $\hat{\mathbf{R}}$ et $\hat{\mathbf{P}}$

III) Résolution de l'équation de Schrödinger dans le cas où le Hamiltonien est indépendant du temps

Les états stationnaires- évolution d'un état quelconque

IV) Paquet d'ondes et courant de probabilité

Interprétation du paquet d'ondes planes et de l'onde plane

Chapitre III : Dynamique des systèmes quantiques

I) Equation de Schrödinger

1) **Postulat 6 :** l'évolution dans le temps est régie par l'équation de Schrödinger

$$\boxed{i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}=\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle}$$

2) Le rôle du temps en Physique quantique. Relation d'incertitude temps-énergie

Le temps n'est pas une observable en physique quantique, contrairement à la position ou à l'impulsion. C'est un paramètre.

4ème principe d'incertitude de Heisenberg :

Pour un système conservatif (voir def plus loin): $\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar$

Avec Δt est le temps au bout duquel le système a évolué de manière significative (appelé souvent temps d'évolution caractéristique du système) et ΔE est l'incertitude sur la mesure de l'énergie du système

Par exemple, pour une évolution périodique du système, le temps caractéristique est la période

II) Théorême d'Ehrenfest

décrit l'évolution au cours du temps de la valeur moyenne <Â> de l'observable Â

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

Démonstration :

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}=\frac{d\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle}{dt}$$

$$=\left(\frac{d\langle\psi(t)|}{dt}\right)\left(\hat{A}|\psi(t)\rangle\right)+\langle\psi(t)|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi(t)\rangle+\langle\psi(t)|\hat{A}\left(\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\right)$$

$$=\frac{-1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle+\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H}|\psi(t)\rangle$$

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}=\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H}-\hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle$$

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

Tout opérateur qui commute avec $\hat{H}$ (et qui ne présente pas de dépendance explicite par rapport au temps) représente une grandeur physique qui est une constante du mouvement : sa valeur moyenne est constante par rapport au temps

exemples

III) Résolution de l’équation de Schrödinger dans le cas où le Hamiltonien est indépendant du temps

$\hat{H}$ est indépendant du temps $\Leftrightarrow$ $\hat{V}$ est indépendant du temps

$\downarrow$

Système conservatif : l’énergie totale moyenne E = $\langle\hat{H}\rangle$ est conservée au cours du temps

Car:

$$E = \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \langle \hat{H} \rangle \qquad \frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dt} = \underbrace{\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} \right\rangle}_{\downarrow\ 0} + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{H}] \rangle = 0$$

L’équation de Schrödinger s’écrit : $i\hbar \dfrac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle$

1) Recherche des états stationnaires

On cherche des états de type:

$$\left|\psi_n(t)\right\rangle = \left|\varphi_n\right\rangle \exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)$$

$\left|\varphi_n\right\rangle$: ket normé indépendant de t

$\exp\left(\frac{-iE_n t}{\hbar}\right)$: Facteur de phase

Ces états sont dits **stationnaires** car :

— **toutes les valeurs moyennes calculées sur ces états sont indépendantes du temps**

$$\left\langle \psi_n(t)\right|\hat{A}\left|\psi_n(t)\right\rangle = \left\langle \varphi_n\right|\hat{A}\left|\varphi_n\right\rangle \quad \text{indép du temps}$$

— **toutes les probabilités calculées sur ces états sont indépendantes du temps**

$$\left|\left\langle u_n \middle| \psi_n(t)\right\rangle\right|^2 = \left|\left\langle u_n \middle| \varphi_n\right\rangle\right|^2 \quad \text{indép du temps}$$

En particulier la densité de probabilité de présence est indépendante du temps

$$\left|\left\langle \mathbf{r} \middle| \psi_n(t)\right\rangle\right|^2 = \left|\left\langle \mathbf{r} \middle| \varphi_n\right\rangle\right|^2$$

$$i\hbar\frac{d\left|\psi_n(t)\right\rangle}{dt}=i\hbar\left(\frac{-iE_n}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{-iE_nt}{\hbar}\right)\left|\varphi_n\right\rangle=\hat{H}\left|\varphi_n\right\rangle\exp\left(\frac{-iE_nt}{\hbar}\right)$$

$\longrightarrow$ L'équation de Schrödinger se réduit à :

$$\hat{H}\left|\varphi_n\right\rangle=E_n\left|\varphi_n\right\rangle$$

forme bien connue de l'équation de Schrödinger

Les kets $\left\{\left|\varphi_n\right\rangle\right\}$ sont vecteurs propres de $\hat{H}$ associés aux valeurs propres (énergies) E_n
Ils constituent une base de ε. Les kets $\left|\varphi_n\right\rangle$, tout comme les kets $\left|\psi_n(t)\right\rangle$ auxquels ils sont associés, sont appelés états stationnaires.

Dans le cours de Nanophysique 2A, on a toujours cherché à résoudre cette équation (en représentation « **r** »). C'est à dire qu'implicitement, on a toujours cherché les états **stationnaires** du système

2) Evolution d'un état quelconque au cours du temps

Un état quelconque se décompose de la façon suivante : $\left|\psi(t)\right\rangle=\sum_n c_n(t)\left|\varphi_n\right\rangle$

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}=i\hbar\sum_n\frac{dc_n(t)}{dt}|\varphi_n\rangle=\sum_n c_n(t)\hat{H}|\varphi_n\rangle=\sum_n c_n(t)E_n|\varphi_n\rangle$$

Projetons sur $\langle\varphi_{n'}|$

$$i\hbar\sum_n\frac{dc_n(t)}{dt}\underbrace{\langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle}_{\delta_{n',n}}=\sum_n c_n(t)E_n\underbrace{\langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle}_{\delta_{n',n}}$$

$$\longrightarrow i\hbar\frac{dc_{n'}(t)}{dt}=c_{n'}(t)\quad E_{n'}$$

À $t = t_0$ $\quad c_{n'}(t)=c_{n'}(t_0)$

$$\longrightarrow c_{n'}(t) = c_{n'}(t_0)\,e^{-i\frac{E_{n'}}{\hbar}(t-t_0)}$$

donc $|\psi(t)\rangle$ s'écrit :

$$\boxed{|\psi(t)\rangle=\sum_n c_n(t_0)e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}|\varphi_n\rangle}$$

Si l'on connaît $|\psi(t_0)\rangle$ à l'instant t_0, c'est-à-dire si l'on connaît tous les coefficients $C_n(t_0)$, alors il est possible de connaître les coefficients $C_n(t)$, c'est à dire $|\psi(t)\rangle$

Remarque) si à t= t_0 $\left|\psi(t=t_0)\right\rangle = \left|\varphi_n\right\rangle$

À l'instant t, l'état du système est : $\left|\psi(t)\right\rangle = e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)}\left|\varphi_n\right\rangle$

C'est à dire égal à $\left|\varphi_n\right\rangle$ à un facteur de phase près
(indiscernabilité concernant la mesure)

$\longrightarrow$ Quand on place un système dans un état propre de $\hat{H}$ ou état stationnaire, il y reste indéfiniment

IV) Ondes planes et paquet d'ondes

1) Interprétation physique de l'onde plane. Description d'un flux de particules.

Interprétation physique de la fonction d'onde (représentation « r ») de type onde plane:

$$\psi(\mathbf{r},t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{r}}e^{-\frac{i}{\hbar}E(\mathbf{p})t}$$

– La densité de probabilité $\left|\langle\psi(\mathbf{r},t)|\psi(\mathbf{r},t)\rangle\right| = |A|^2$ est indépendante de la position **r**

– Cette fonction n'est pas de carré sommable: elle ne peut **pas** décrire l'état d'une particule **unique**

Question: comment décrire en Physique quantique **un flux de particules** ?

→ L'état d'onde plane $\psi(\mathbf{r},t)$ est associé à un courant de particules de vitesse **p**/m et de densité volumique de particules proportionnelle à $|A|^2$

Cet état d'onde plane, bien que ne pouvant décrire l'état **d'une seule** particule, permet de de décrire **un flux de particules**

Exemple : flux d'électrons sur une cible

Flux d'électrons

cible

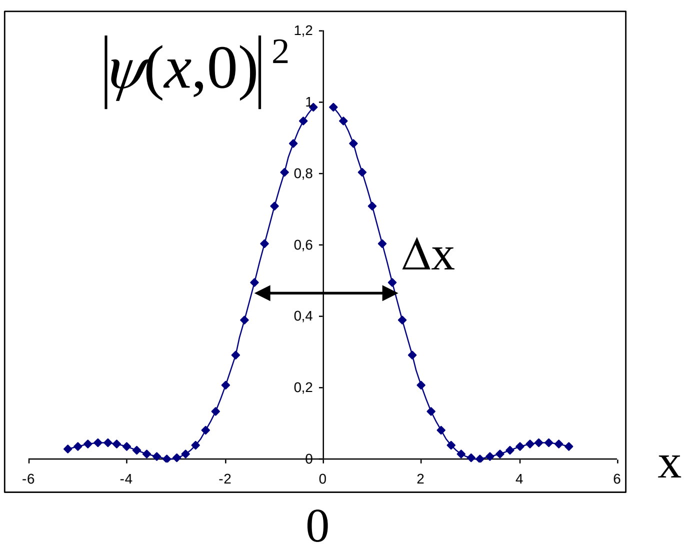
onde plane **p**

2) **Paquet d'ondes**

Pour décrire un système **relativement localisé** dans l'espace (en représentation « **r** », on utilise un paquet d'ondes : c'est une superposition linéaire de fonctions d'ondes planes

$$\psi(\mathbf{r},t)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int_{R^3}\overline{\psi}(\mathbf{p})e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{r}}e^{-\frac{i}{\hbar}E(\mathbf{p})t}d^3p$$

Exemple à 1 dimension de la densité de probabilité de présence d'une particule localisée à l'origine à l'instant t = 0:



Localisation dans l'espace à Δx près

Chaque composante, c'est à dire chaque onde plane d'impulsion **p** a pour poids la transformée de Fourrier $\overline{\psi}(\mathbf{p})$ de la fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$

$$\overline{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{R^3} e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{p}\bullet\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) d^3 r$$

Ce paquet d'onde est de carré sommable, alors que les ondes planes ne le sont pas individuellement. Il décrit correctement l'état d'**une** particule.

Pour simplifier, étudions le paquet d'ondes à une dimension:

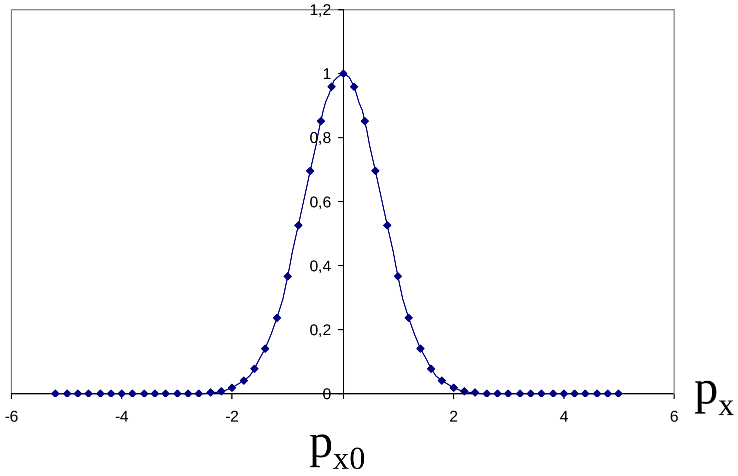
$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_R \overline{\psi}(p_x) e^{\frac{i}{\hbar}p_x \bullet x} e^{-\frac{i}{\hbar}E(p_x)\bullet t} dp_x$$

À t = 0 $$\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_R \overline{\psi}(p_x)e^{\frac{i}{\hbar}p_x\bullet x}dp_x$$

$$\overline{\psi}(p_x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_R \psi(x,0)e^{-\frac{i}{\hbar}p_x\bullet x}dx$$

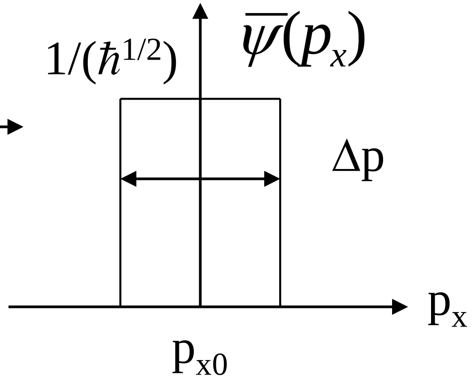
$\overline{\psi}(p_x)$ est la TF de $\psi(x,0)$

$\left|\overline{\psi}(p_x)\right|$



Exemple simple : construisons le paquet d’ondes correspondant à la donnée des $\overline{\psi}(p_x)$ réels

Poids des composantes
Intervenant dans le paquet d’onde



Le calcul donne : $$\psi(x,0)=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\sin\left(\frac{\Delta p}{2\hbar}x\right)}{x}e^{\frac{i}{\hbar}p_{x0}\bullet x}$$

$$|\psi(x,0)|^2=\frac{2}{\pi}\frac{\sin^2\left(\frac{\Delta p}{2\hbar}x\right)}{x^2}$$

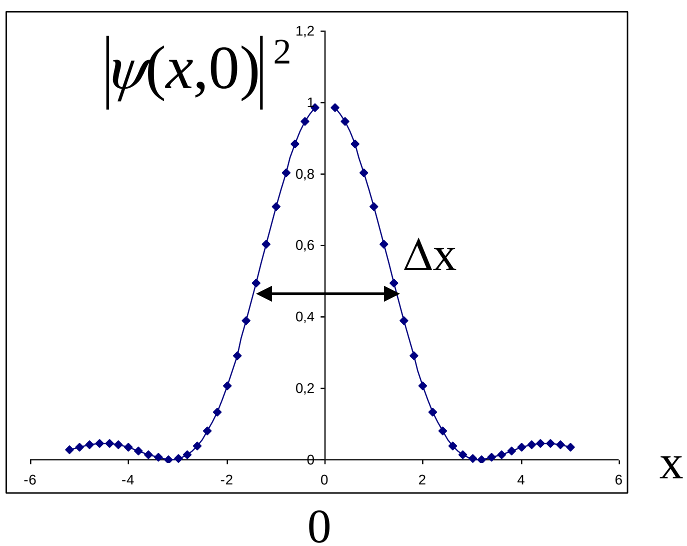


figure de type « diffraction »

Localisation dans l’espace
à Δx près

Δx Δp~h

3) Evolution temporelle du paquet d’ondes

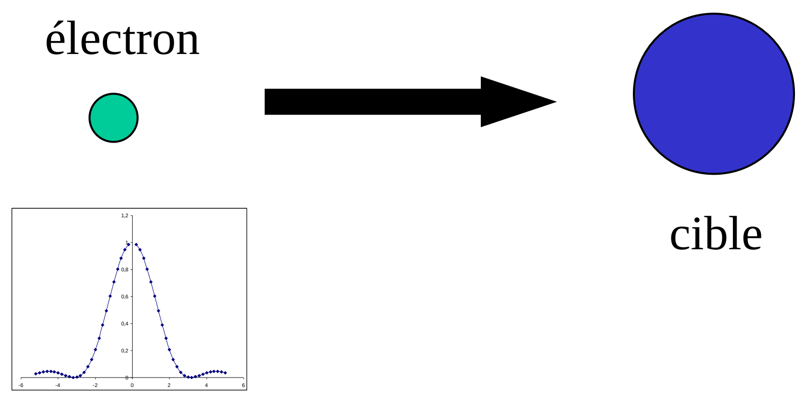
Le paquet d’ondes libre se **déplace** et s’**étale** au cours du temps

On est souvent amené à étudier l’évolution du paquet d’ondes lorsqu’il rencontre une variation brusque de potentiel (puits, barrière, marche de potentiel)

Voir site web: Manuel Joffre, Ecole Polytechnique,
http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/

Ce type de description est utilisé lors d’expériences de diffusion :

Par exemple : diffusion d’un électron par une cible
L’électron est représenté par un paquet d’ondes planes

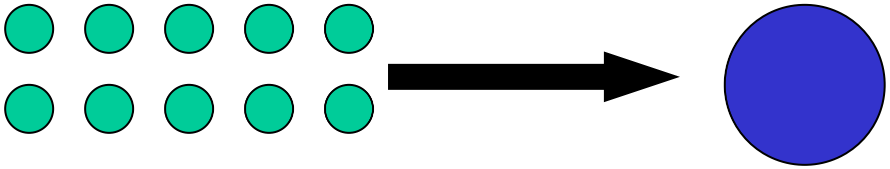


Paquet d’ondes planes

4) Bilan

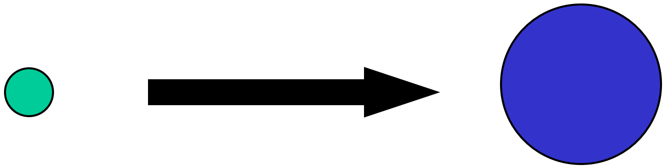
Pour représenter un **flux de particules**

→ Onde plane



Pour représenter une particule **unique** **relativement localisée**

→ Paquet d'ondes planes



Lorsque l'on veut traiter le cas d'une particule relativement localisée diffusée par un potentiel (ex: marche de potentiel, barrière de potentiel, puits de potentiel)

→ de manière rigoureuse, on doit étudier le transmission et la réflexion du paquet d'ondes représentant un électron

Mais on peut montrer que les coefficients de transmission et de réflexion calculés alors sont les mêmes que ceux calculés pour une onde plane

Pour **simplifier** les calculs, on calcule donc les coefficients de transmission et de réflexion d'une onde plane et **on raisonne en terme de flux de particules** (ex : effet tunnel…)