

Chapitre 1

Rappel : Postulats de la Mécanique Quantique

1.1 Postulats de la Mécanique Quantique

1.1.1 Postulat 1 : Description de l'état d'un système

L'état d'un système physique quantique est déterminé, à chaque instant t , par la donnée d'un vecteur ket $|\psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états \mathbb{E} . $|\psi(t)\rangle$ est appelé vecteur d'état du système.

Supposons que $|\psi_1\rangle$ représente une particule avec une valeur pour une certaine propriété comme la position, et que $|\psi_2\rangle$ représente la même particule avec une valeur différente. En mécanique quantique, la superposition de deux états est à nouveau un état du système. Si $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont des états possibles d'un système, alors

$$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle,$$

où α et β sont des nombres complexes.

1.1.2 Postulat2 : Description des grandeurs physiques ou principe de correspondance

A toute grandeur physique mesurable \mathcal{A} est associée un opérateur linéaire A hermétique agissant dans l'espace des états \mathbb{E} . A est une observable.

A chaque grandeur physique \mathcal{A} ayant un équivalent en mécanique classique on lui associe une observable en utilisant le principe de correspondance :

Grandeur physique classique	Observable (M. Quantique)
vecteur impulsion $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$	observable $\vec{P} = (P_X, P_Y, P_Z) = -i\hbar\vec{\nabla}$
fonction $\mathcal{A}(\vec{r}, \vec{p})$	fonction observable $A(\vec{R}, \vec{P})$
moment cinétique $\vec{l} = \vec{r} \wedge \vec{p}$	opérateur moment cinétique $\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{P}$
Energie $E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$	$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})$ $P^2 = P_X^2 + P_Y^2 + P_Z^2$

1.1.3 Postulat 3 : Résultat d'une mesure :

La mesure d'une grandeur physique \mathcal{A} ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres de l'observable A . Si on prépare le système dans un état propre $|\varphi_n\rangle$ de l'observable A correspondant à la valeur propre a_n , le résultat de la mesure de A est certain, c'est a_n .

Les vecteurs propres étant l'état quantique du système immédiatement après la mesure et résultant de cette mesure.

1.1.4 Postulat 4 : Décomposition spectrale ou Règle de Born :

La mesure d'une grandeur physique représentée par l'observable A , effectuée sur l'état quantique normalisé $|\psi\rangle$, donne comme résultat la valeur propre a_n , avec la probabilité $P(a_n)$.

Ce postulat permet de préciser les règles de prédiction des résultats de mesure d'une grandeur physique \mathcal{A} , il permet de calculer les probabilités de mesure. On distingue deux cas :

a. Les valeurs propres a_n sont non dégénérées :

Considérons un système physique décrit à l'instant t par le ket $|\psi\rangle$ tel que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. $|\psi\rangle$ se décompose sur la base des vecteurs propres de l'observable A :

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\varphi_k\rangle$$

Lorsque on mesure la grandeur physique \mathcal{A} sur un système physique qui se trouve dans l'état $|\psi\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée a_n de l'observable \mathcal{A} est

$$P(a_n) = |\langle\varphi_n|\psi\rangle|^2 = |c_n|^2$$

b. Les valeurs propres a_n sont dégénérées :

Lorsqu'on mesure la grandeur physique \mathcal{A} sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ donné, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre a_n de l'observable \mathcal{A} correspondante est donnée par :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle\varphi_n^i|\psi\rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \quad (1.1)$$

où g_n est le degré de dégénérescence de a_n . $\mathcal{E}_n = \{|\varphi_n^i\rangle, i = 1, \dots, g_n\}$ est un système orthonormé complet de vecteurs propres de l'observable A .

Dans ce cas, l'état du système peut s'écrire comme une décomposition sur la base des kets propres de A , et on a :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \sum_k c_k^i |\varphi_k^i\rangle$$

Remarque :

Si l'état $|\psi\rangle$ n'est pas normé, il faut diviser les quantités précédentes par $\langle\psi|\psi\rangle$, par exemple :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|\langle\varphi_n^i|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|c_n^i|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

Conséquences

— **Valeur moyenne :**

Mesurons A sur un grand nombre de systèmes physiques identiques tous dans l'état $|\psi\rangle$. Si le spectre de A est discret, la valeur moyenne de A dans l'état $|\psi\rangle$ est :

$$\langle\mathcal{A}\rangle_\psi = \sum_n a_n P(a_n) = \langle\psi|A|\psi\rangle \quad (1.2)$$

L'écart quadratique moyen est noté :

$$\Delta\mathcal{A} = \sqrt{\langle\mathcal{A}^2\rangle - \langle\mathcal{A}\rangle^2} \quad (1.3)$$

$$= \sqrt{\langle\psi|A^2|\psi\rangle - \langle\psi|A|\psi\rangle^2} \quad (1.4)$$

Si $|\psi\rangle$ est vecteur propre de A , on a $\Delta\mathcal{A} = 0$.

c. **Cas d'une base continue non dégénérée** Lorsqu'on mesure la grandeur physique \mathcal{A} sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ normé, la probabilité $dp(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ vaut :

$$dP(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2$$

où $|v_\alpha\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre α de l'observable A associée à \mathcal{A} .

1.1.5 Postulat5 : Réduction du paquet d'onde

En mécanique quantique, lorsqu'on effectue une mesure, le système passe d'un état de superposition (un paquet d'ondes), vers un état défini et unique, caractérisé par un vecteur propre de l'observable en question : on dit qu'il y a réduction du paquet d'ondes.

Si la mesure de l'observable A sur le système dans l'état $|\psi\rangle$ donne la valeur propre a_n , alors l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée de $|\psi\rangle$, soit :

$$|\psi'\rangle = \frac{\mathbb{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_n|\psi\rangle}}$$

\mathbb{P}_n est l'opérateur projecteur sur le sous-espace propre associé à la valeur propre a_n

a. si a_n est non dégénérée, $\mathbb{P}_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$ l'état du système après la mesure sera :

$$|\psi'\rangle = \frac{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle}} = |\varphi_n\rangle$$

donc, si a_n est non dégénérée l'état du système après la mesure est le vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ associé.

b. si a_n est dégénérée, $\mathbb{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle\langle\varphi_n^i|$, l'état du système après la mesure sera :

$$|\psi'\rangle = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle\langle\varphi_n^i|\psi\rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|\varphi_n^i\rangle\langle\varphi_n^i|\psi\rangle}} = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |\varphi_n^i\rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}}$$

Ce postulats exprime de manière formelle qu' après une mesure, le système se retrouve dans l'état propre associé à la valeur propre qui a été mesurée. Si la valeur propre est dégénérée, le système se trouve plutôt dans une superposition des états appartenant au sous-espace dégénéré.

1.1.6 Postulat6 : Évolution temporelle des états :

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ d'un système physique est déterminée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle . \quad (1.5)$$

avec H est l'observable associée à l'énergie totale du système, appelé opérateur hamiltonien, il dépend , en général du temps.

Dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, l'hamiltonien d'une particule soumise à un potentiel s'écrit :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{R}) \quad (1.6)$$

L'équation de Schrödinger est l'équation dynamique de la mécanique quantique.

1.2 Contenu physique de l'équation de Schrödinger :

1.2.1 Conservation de la norme

La norme du vecteur d'état d'un système reste constante au cours du temps. En effet, on montre que :

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \psi \rangle = 0.$$

En effet :

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

En utilisant l'équation de Schrödinger

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

et son conjuguée , on obtient :

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \psi \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | H | \psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | H | \psi \rangle = 0$$

1.2.2 Evolution d'un système physique conservatif

Si le système physique est conservatif, son hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps c'est à dire qu'il est soumis à un potentiel indépendant du temps, les états propres de H sont donnés par $|\varphi_n^i\rangle$, $i = 1, \dots, g_n$ tels que :

$$H |\varphi_n^i\rangle = E_n |\varphi_n^i\rangle \quad (1.7)$$

Les valeurs propres E_n déterminent les différents niveaux d'énergies du système.

Les états propres $|\varphi_n^i\rangle$ de l'observable H forment une base orthonormée complète de \mathbb{E} , donc tout état $|\psi(t)\rangle$ peut s'écrire comme suit :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_n^i(t) |\varphi_n^i\rangle, \quad c_n^i(t) \in \mathbb{C} \quad (1.8)$$

avec $c_n^i(t) = \langle \varphi_n^i | \psi \rangle$ sont exprimés comme suit :

$$c_n^i(t) = c_n^i(0) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (1.9)$$

l'équation (1.8) prend la forme suivante

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_n^i(0) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n^i\rangle \quad (1.10)$$

A l'instant initial $t = t_0$, l'état du système est décrit par le ket $|\psi(t_0)\rangle$, ce qui permet d'écrire :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n,i} c_n^i(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n^i\rangle \quad (1.11)$$

Remarque :

Si l'état initial $|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_k\rangle$ est un état propre de H avec la valeur propre E_k :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \delta_{kn} e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n\rangle \quad (1.12)$$

$$= e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (1.13)$$

$|\psi(t)\rangle$ et $|\psi(t_0)\rangle$ sont physiquement indiscernables, ils ne diffèrent que par un facteur de phase près. Donc, toutes les propriétés physiques d'un système qui se trouve dans un état propre de H ne varient pas au cours du temps. Les états propres de H sont appelés donc des états stationnaires.

1.2.3 Evolution de la valeur moyenne

La valeur moyenne d'une observable dans l'état $|\psi(t)\rangle$ est donnée par :

$$\langle \mathcal{A} \rangle_t = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad (1.14)$$

Théorème 1. (*Ehrenfest*) l'évolution de la valeur moyenne d'une observable A au cours du temps est régie par l'équation suivante :

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{A} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle. \quad (1.15)$$

Remarque :

Si $[A, H] = 0$: on peut trouver un système de vecteurs propres $\{|\varphi_n\rangle\}$ communs aux opérateurs A et H :

$$A |\varphi_n\rangle = a_n |\varphi_n\rangle \quad (1.16)$$

$$H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (1.17)$$

donc $\{H, A\}$ est un ECOG.

- Comme les kets $|\varphi_n\rangle$ sont des états stationnaires, la mesure à l'instant t_0 de l'observable A donne la valeur propre a_n .
- L'état immédiatement après la mesure sera $|\varphi_n\rangle$ qui est aussi état propre de H .
- La mesure de l'observable A à un instant ultérieure donne a_n avec certitude. Dans ce cas, **les valeurs propres de A sont appelées bons nombres quantiques.**

1.2.4 Courant de probabilité

Considérons une particule de masse m soumise à un potentiel $V(\vec{r})$, la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ qui décrit l'état quantique de la particule est donnée par l'équation de Schrodinger :

$$i\hbar\partial_t\psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (1.18)$$

Le complexe conjugué de cette expression est donné par :

$$-i\hbar\partial_t\psi^*(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi^*(\vec{r}, t) \quad (1.19)$$

En multipliant respectivement à gauche et droite les équations (1.18) et (1.19) par $\psi^*(\vec{r}, t)$ et $\psi(\vec{r}, t)$ et après soustractions termes à terme des deux expressions on obtient :

$$i\hbar [\psi^*(\vec{r}, t)\partial_t\psi(\vec{r}, t) + \psi(\vec{r}, t)\partial_t\psi^*(\vec{r}, t)] = -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^*(\vec{r}, t)\nabla^2\psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t)\nabla^2\psi^*(\vec{r}, t)] \quad (1.20)$$

ou encore :

$$i\hbar\partial_t [\psi^*\psi] = i\hbar\partial_t [\psi\psi^*] = -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*] \quad (1.21)$$

En écrivant le Laplacien ∇^2 en terme des dérivées partielles, on peut développer l'expression (1.21) comme suit :

$$\begin{aligned} \partial_t [\psi^*\psi] &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \psi - \psi (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \psi^*] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [\partial_x [\psi^*\partial_x\psi] - \cancel{\partial_x\psi^*\partial_x\psi} + \partial_y [\psi^*\partial_y\psi] - \cancel{\partial_y\psi^*\partial_y\psi} + \partial_z [\psi^*\partial_z\psi] - \cancel{\partial_z\psi^*\partial_z\psi} \\ &\quad \partial_x [\psi\partial_x\psi^*] + \cancel{\partial_x\psi\partial_x\psi^*} - \partial_y [\psi\partial_y\psi^*] + \cancel{\partial_y\psi\partial_y\psi^*} - \partial_z [\psi\partial_z\psi^*] + \cancel{\partial_z\psi\partial_z\psi^*}] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [\partial_x (\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*) + \partial_y (\psi^*\partial_y\psi - \psi\partial_y\psi^*) + \partial_z (\psi^*\partial_z\psi - \psi\partial_z\psi^*)] \\ &= [\partial_x J_x + \partial_y J_y + \partial_z J_z] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot \vec{J} \end{aligned}$$

avec

$$J_\alpha = \frac{i\hbar}{2m} (\psi^*\partial_\alpha\psi - \psi\partial_\alpha\psi^*), \quad \alpha = x, y, z$$

Si on pose $\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)$, l'équation (1.21) s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0. \quad (1.22)$$

Cette équation est identique à l'équation de continuité dans un fluide de masse volumique $\rho(\vec{r}, t)$ et de vecteur densité de courant $\vec{J}(\vec{r}, t)$.

$\vec{J}(\vec{r}, t)$ est appelé **densité de courant de probabilité**.

1.3 Application aux observables de position et d'impulsion \vec{R} et \vec{P}

Considérons les cas d'une particule sans spin soumise à un potentiel scalaire et stationnaire $V(\vec{R})$, le hamiltonien du système est donné par :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R}) \quad (1.23)$$

l'évolution des valeurs moyennes des observables \vec{R} et \vec{P} est régie par le théorème de d'Ehrenfest (1.15) :

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, H] \rangle_t + \left\langle \frac{\partial \vec{R}}{\partial t} \right\rangle_t. \quad (1.24)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle_t = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, H] \rangle_t + \left\langle \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \right\rangle_t. \quad (1.25)$$

Les observables (\vec{R}) et $V(\vec{P})$ ne dépendent pas explicitement du temps, donc $\frac{\partial \vec{R}}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = 0$

D'autre part, les commutateurs

$$[\vec{R}, H] = \left[\vec{R}, \frac{P^2}{2m} \right] + \underbrace{[\vec{R}, V(\vec{R})]}_{=0} \quad (1.26)$$

$$= \frac{1}{2m} i\hbar \frac{\partial P^2}{\partial P} \quad (1.27)$$

$$= \frac{1}{2m} i\hbar 2P = i\hbar \frac{P}{m} \quad (1.28)$$

donc :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \vec{R} \rangle_t = \frac{\langle \vec{P} \rangle}{m}} \quad (1.29)$$

de même on montre que :

$$[\vec{P}, H] = \underbrace{\left[\vec{P}, \frac{P^2}{2m} \right]}_0 + [\vec{P}, V(\vec{R})] \quad (1.30)$$

$$= -i\hbar \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial R} \quad (1.31)$$

$$= -i\hbar \vec{\nabla}_r V(\vec{R}) \quad (1.32)$$

donc :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle_t = - \langle \vec{\nabla}_r V(\vec{R}) \rangle} \quad (1.33)$$

$$\text{où } \vec{\nabla}_r = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

Remarque :

Les expressions (1.29) et (1.33) sont l'analogie quantique des équations de Newton pour les valeurs moyennes. Dans la cas classique, on a :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v} \quad (1.34)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\vec{\nabla}_r V(\vec{r}) = \vec{F} \quad (1.35)$$

où \vec{F} est la force qui dérive du potentiel $V(\vec{r})$

1.4 Opérateur d'évolution $U(t, t_0)$

1.4.1 Définition et propriétés

L'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ permet de déterminer l'état d'évolution $|\psi(t)\rangle$ d'un système physique à partir de son état initial $|\psi(t_0)\rangle$:

$$|\psi(t_0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1.36)$$

L'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ vérifie les propriétés suivantes

Propriétés :

— **(Linéarité)** : Si un état $|\psi_1(t_0)\rangle$ évolue vers l'état $|\psi_1(t)\rangle$ et si un état $|\psi_2(t_0)\rangle$ évolue vers l'état $|\psi_2(t)\rangle$ alors on a :

$$U(t, t_0)(c_1 |\psi_1(t_0)\rangle + c_2 |\psi_2(t_0)\rangle) = c_1 U(t, t_0) |\psi_1(t_0)\rangle + c_2 U(t, t_0) |\psi_2(t_0)\rangle . \quad (1.37)$$

— **(composition)** La composition de deux opérateurs d'évolution sur deux intervalles temporelles consécutifs $t_0 \longrightarrow t_1 \longrightarrow t_2$ satisfait la relation suivante :

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0). \quad (1.38)$$

on lit cette expression de la droite vers la gauche !.

On peut en déduire que :

$$U(t_0, t)U(t, t_0) = U(t_0, t_0) = \mathbb{1} \implies U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t). \quad (1.39)$$

— (Unitarité) :

$$U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0). \quad (1.40)$$

En effet :

L'opération **(1.36)** doit conserver la norme $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$:

$$\langle \psi(t_0) | U(t, t_0)^+ U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle \quad (1.41)$$

ce qui conduit à l'unitarité de l'opérateur d'évolution :

$$U(t, t_0)^+ U(t, t_0) = \mathbb{1}. \quad (1.42)$$

ce qui permet d'écrire :

$$U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t). \quad (1.43)$$

1.4.2 Forme infinitésimale de l'opérateur U

D'après l'équation de Schrödinger on peut écrire que :

$$d(|\psi(t)\rangle) = -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle dt \quad (1.44)$$

la forme différentielle de cette équation :

$$|\psi(t + dt)\rangle - |\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi(t)\rangle dt \quad (1.45)$$

Ainsi l'équation différentielle détermine une évolution de $|\psi(t)\rangle$ dans un intervalle infinitésimal $[t, t + dt]$ comme suit :

$$|\psi(t)\rangle \longmapsto |\psi(t + dt)\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) |\psi(t)\rangle \quad (1.46)$$

On définit l'opérateur d'évolution infinitésimale par la quantité :

$$U(t + dt, t) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt. \quad (1.47)$$

Cet opérateur vérifie toutes les propriétés(**1.37-1.40**), par exemple :

$$U(t + dt, t)^+ U(t + dt, t) = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) = \mathbb{1} + o(dt^2) \quad (1.48)$$

dt est suffisamment trop petit, on peut prendre $dt^2 = 0$.

1.4.3 Equation différentielle de l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$.

En utilisant la composition de l'opérateur d'évolution pour $t_0 < t < t + dt$ pour écrire :

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t) U(t, t_0) = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) U(t, t_0) \quad (1.49)$$

On peut en déduire :

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H U(t, t_0) \quad (1.50)$$

De manière générale la solution de cette équation est obtenue par intégration et donnée par :

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t) dt}, \text{ pour } [H(t), H(t')] = 0 \quad (1.51)$$

Si $H(t) = H$ est indépendant du temps cette expression se simplifie pour s'écrire sous la forme suivante :

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \quad (1.52)$$

Exercice:

Soit $U = \mathbb{1} + \delta U$ une forme différentielle de l'opérateur unitaire U , montrer $\delta U^+ = -\delta U$

1.4.4 Schémas (ou représentations) d'évolution.

1.4.4.1 Représentation de Schrödinger

Dans la représentation de Schrödinger, les opérateurs sont constants, mais les états notés $|\psi(t)\rangle_S$ évoluent dans le temps selon l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_S = H |\psi(t)\rangle_S \quad (1.53)$$

l'évolution peut être décrite en utilisant l'opérateur $U(t_0, t)$:

$$|\psi(t)\rangle_S = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_S$$

Dans la description de Shrödinger, l'observable A_S ne dépend pas du temps, $\frac{\partial A_S}{\partial t} = 0$. L'évolution de la valeur moyenne de A_S est donnée par le théorème de Ehrenfest (1.15) :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A_S, H] \rangle \quad (1.54)$$

1.4.4.2 Représentation de Heisenberg

La valeur moyenne d'une observable A_S s'écrit :

$$\langle A \rangle = {}_S \langle \psi(t) | A_S | \psi(t) \rangle_S \quad (1.55)$$

$$= {}_S \langle \psi(t_0) | U(t, t_0)^+ A_S U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle_S \quad (1.56)$$

on définit l'opérateur de Heisenberg A_H par

$$A_H = U(t, t_0)^+ A_S U(t, t_0) \quad (1.57)$$

ainsi la valeur moyenne de l'observable A_H est définie dans la représentation de Heisenberg par :

$$\langle A \rangle = {}_H \langle \psi(t) | A_H | \psi(t) \rangle_H \quad (1.58)$$

avec

$$|\psi(t)\rangle_H = |\psi(t_0)\rangle_S = U(t_0, t)^+ |\psi(t)\rangle_S \quad (1.59)$$

On remarque que A_H évolue au cours du temps par contre, $\frac{\partial |\psi_H(t)\rangle}{\partial t} = 0$.

1.4.4.3 Equation de mouvement de Heisenberg

Une observable A_H en représentation de Heisenberg satisfait à l'équation suivante :

$$\boxed{\frac{d}{dt}A_H = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right)_H} \quad (1.60)$$

avec $H_H = U(t, t_0)^+ H U(t, t_0) = H$.

Remarque.

Si l'observable A dépend des variables p et q l'équation (1.60) est identifiée à l'équation de mouvement classique :

$$\frac{1}{i\hbar}[A_H, H] \longrightarrow \{\mathcal{A}, \mathcal{H}\} \quad (1.61)$$

où $\{, \}$ est le crochet de Poisson

1.4.4.4 Représentation d'interaction

Considérons un hamiltonien

$$H = H_0 + V(t) \quad (1.62)$$

où $V(t)$ est un potentiel et H_0 est un hamiltonien qui ne dépend pas explicitement du temps et vérifie l'équation aux valeurs propres :

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (1.63)$$

Dans la représentation de Shrödinger l'état du système à l'instant t est donné par :

$$|\psi(t)\rangle_S = U(t, 0) |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} |\psi(0)\rangle \quad (1.64)$$

$$= \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle \quad (1.65)$$

$$= \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\varphi_n\rangle. \quad (1.66)$$