Dynamique des systèmes quantiques

Un neo-TeXnicien

18 février 2019

1 Opérateur d'évolution

Considérons un système quantique (S) qui évolue entre deux instants t_0 et t_1, et passe d'un état $\mid \Phi(t_0) >$ à un état $\mid \Phi(t_1) >$. Ces deux états sont reliés par un opérateur $\hat{U}(t_0, t_1)$ sur l'espace des états, défini par la relation :
$\mid \Phi(t_1) >= \hat{U}(t_0, t_1) \mid \Phi(t_0) >$.

1.1 Propriétés fondamentales

1. La physique étant linéaire, une combinaison linéaire d'états évolue comme la combinaison linéaire des évolutions.
   Autrement dit, l'opérateur $\hat{U}$ **doit être linéaire**.
2. Les lois physiques sont invariantes par translation dans le temps.
   L'opérateur $\hat{U}$ **doit être une fonction d'une unique variable** Δt.
   Par abus de notation, en choisissant $t_0 = 0$, on écrira simplement :
   $$\mid \Phi(t) >= \hat{U}(t) \mid \Phi(0) >$$
3. En physique classique, deux états initiaux différents ne peuvent mener au même état final au cours d'une même évolution. Dans le cas contraire, soit le monde ne serait pas réversible, soit il ne serait pas déterministe.
   Pour conserver ce déterminisme il nous faut préciser ce que sont des états différents dans le formalisme quantique.
   Seuls les états propres ont une valeur bien définie de la grandeur mesurée, et ils forment une base orthogonale de l'espace des états. Ce sont les états fondamentalement différents. On va donc exiger que des états orthogonaux évoluent suivant deux nouveaux états orthogonaux.
   Ceci implique que l'opérateur $\hat{U}$ conserve le produit scalaire, autrement dit, $\hat{U}$ **doit être unitaire**, ce qui s'écrit :
   $$\hat{U}^*\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^* = Id$$

L'opérateur $\hat{U}$ est donc inversible avec $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^*$, et on aura également :

$$||\vec{\Phi}||^2 =< \Phi(t) \mid \Phi(t) >=< \Phi(0) \mid \Phi(0) >= Constante,$$

sauf au moment de la mesure, dans l'interprétation de Copenhague, puisqu'alors le système se projette dans l'état correspondant au résultat de cette mesure.

1.2 Évolution infinitésimale

On part de l'idée intuitive selon laquelle un système physique passe de manière continue d'un état $\mid \Phi(t) >$ à l'état $\mid \Phi(t{+}\delta t) >$. En dehors de la mesure, **le système suit une évolution continue**, ce que l'on traduit sur l'opérateur d'évolution $\widehat{U(\delta t)}$, en le développant au premier ordre en δt :

$$\widehat{U(\delta t)} = \hat{I}d + \delta t \; \hat{K} = \hat{I}d - i \; \frac{\delta t}{\hbar} \; \hat{H}$$

où $\hat{K}$ et $\hat{H}$ sont deux opérateurs à priori quelconques sur l'espace des états.
La contition d'unitarité sur l'opérateur $\hat{U}$ se traduit ainsi :

$$i \; \frac{\delta t}{\hbar}(\hat{H}^* - \hat{H}) + (\frac{\delta t}{\hbar})^2 \hat{H}\hat{H}^* = 0$$

ce qui entraîne $\hat{H} = \hat{H}^*$ au premier ordre et donc l'opérateur **H doit être un opérateur hermitien**. Cet opérateur correspond donc à **une observable du système** qu'on appelle générateur des translations dans le temps, ou **Hamiltonien**. Il caractérise les petites variations dans le temps du système et possède la dimension d'une **énergie**, en Joules.

2 L'équation de Schrödinger et solutions

2.1 Équation d'évolution

$$\mid \Phi(t + \delta t) >= \widehat{U(\delta t)} \mid \Phi(t) >= \mid \Phi(t) > -i \; \frac{\delta t}{\hbar} \; \hat{H} \mid \Phi(t) >$$

$$\frac{\partial \mid \Phi(t) >}{\partial t} = \frac{\mid \Phi(t + \delta t) > - \mid \Phi(t) >}{\delta t} = -\frac{i}{\hbar} \; \hat{H} \mid \Phi(t) >$$

ce qui permet d'obtenir la célèbre **équation de Schrödinger** :

$$i \, \hbar \frac{\partial \mid \Phi(t) >}{\partial t} = \hat{H} \mid \Phi(t) >$$

dans laquelle la physique est contenue dans l'opérateur $\hat{H}$.

2.2 États stationnaires

Considérons les couples de valeurs propres et vecteurs propres $(E_n, \mid \varphi_n(t)>)_{n\in I}$ pour l'Hamiltonien $\hat{H}$. On a alors :

$$i\,\hbar \frac{\partial \mid \varphi_n(t)>}{\partial t} = \hat{H} \mid \varphi_n(t)> = E_n \mid \varphi_n(t)>$$

En supposant $\hat{H}$ **indépendant de t**, et donc les valeurs E_n, cette équation différentielle admet pour solution générale :

$$\mid \varphi_n(t)> = e^{-i\,\frac{E_n t}{\hbar}} \mid \varphi_n(0)> = e^{-i\,\omega_n t} \mid \varphi_n(0)>$$

en posant $\hbar\,\omega_n = E_n$, ce qui permet d'ailleurs de retrouver $E = h\nu$.

Les états propres de l'Hamiltonien du système évoluent donc à un facteur de phase près. Mais de tels états sont identiques, ce qui signifie que ce **sont des états stationnaires**.
Comme ces états n'évoluent pas, ils conservent leurs valeurs propres, si bien que les grandeurs E_n sont des invariants du système.
Le théorème de Noether assure qu'à chaque symétrie de l'espace-temps correspond une grandeur physique qui se conserve. Dans le cas de l'invariance des lois physiques dans le temps, c'est l'énergie qui se conserve, et c'est la seule grandeur qui se conserve toujours. Cela confirme le lien entre l'Hamiltonien et l'énergie du système.

2.3 Évolution d'un état quelconque

Partant d'un état initial quelconque $\mid \Phi(0)> = \sum_{n\in I} \alpha_n \mid \varphi_n(0)>$, le système évolue pour donner l'état final $\mid \Phi(t)> = \sum_{n\in I} \alpha_n \mid \varphi_n(t)> = \sum_{n\in I} \alpha_n e^{-i\,\omega_n t} \mid \varphi_n(0)>$ par linéarité de l'Hamiltonien. Les phases autour des vecteurs propres évoluent à des vitesses différentes, et c'est précisément ce phénomène qui génère l'évolution du système.

2.4 Conservation de l'énergie

Seuls les états propres de l'Hamiltonien ont une valeur bien définie de la mesure. On peut tout de même déterminer la valeur moyenne de $\hat{H}$ au cours de l'évolution. Un calcul simple permet de montrer que cette valeur moyenne est invariante.
Partant d'un état initial quelconque $\mid \Phi(0)> = \sum_{n\in I} \alpha_n \mid \varphi_n(0)>$, on obtient :

$$<\widehat{H(0)}> = <\Phi(0) \mid \hat{H} \mid \Phi(0)> = \sum_{n\in I} |\alpha_n|^2 E_n = <\Phi(t) \mid \hat{H} \mid \Phi(t)> = <\widehat{H(t)}>$$

Cet Hamiltonien a donc la propriété extraordinnaire de se conserver en moyenne, quelle que soit l'évolution. Il ne peut correspondre qu'à l'énergie du système...

2.5 Opérateur d'évolution

Dans une base de vecteurs propres $(\mid \varphi_n >)_{n\in I}$ pour $\hat{H}$, associée aux valeurs propres $(E_n)_{n\in I}$, les résultats précédents permettent de définir l'opérateur d'évolution $\widehat{U(t)}$ simplement par :

$$\widehat{U(t)} \mid \varphi_n >= e^{-i\,\frac{E_n t}{\hbar}} \mid \varphi_n >$$

Comme dans cette base on a $\hat{H} = Diag(E_1, E_2, ..., E_n, ...)$, on peut aussi écrire l'opérateur d'évolution à l'aide d'une exponentielle de la matrice $\hat{H}$:

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

L'Hamiltonien permet de générer l'opérateur d'évolution.

2.6 Évolution d'une grandeur

Considérons une grandeur observable $\hat{G}$ du système. On a :

$$\frac{\partial}{\partial t} <\hat{G}>= \frac{\partial}{\partial t} <\Phi(t) \mid \hat{G} \mid \Phi(t)>= \frac{\partial}{\partial t}(<\Phi(t) \mid)\ \hat{G} \mid \Phi(t)> + <\Phi(t) \mid \hat{G} \mid \frac{\partial}{\partial t} \mid \Phi(t)>$$

Compte tenu de l'équation de Schrödinger, $i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t} \mid \Phi(t)>= \hat{H} \mid \Phi(t)>$ on aussi, en passant aux "bras" : $i\,\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mid\ <\Phi(t) \mid =<\Phi(t) \mid \hat{H}^* =<\Phi(t) \mid \hat{H}$, ce qui donne :

$$\frac{\partial}{\partial t} <\hat{G}>= \frac{i}{\hbar} <\Phi(t) \mid HG - GH \mid \Phi(t)>$$

Ceci nous permet d'énoncer la propriété suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} <\hat{G}>= \frac{i}{\hbar} <\widehat{[\hat{H}, \hat{G}]}>$$

où $<\widehat{[\hat{H}, \hat{G}]}>$ désigne le commutateur des opérateurs $\hat{H}$ et $\hat{G}$. Donc si $\hat{G}$ commute avec l'Hamiltonien $\hat{H}$, la valeur moyenne de $\hat{G}$ n'évolue pas.
Finalement, **les grandeurs physiques qui commutent avec l'Hamiltonien se conservent**.

3 Action d'un champs magnétique sur un spin 1/2

Puisque le monde est quantique au niveau fondamental de la matière, nos observations macroscopiques n'en sont que des conséquences. Il paraît alors naturel de partir de la version classique d'un problème pour tenter d'en donner la version quantique, en remplaçant les grandeurs classiques par des opérateurs.

3.1 Hamiltonien semi-classique

Dans cet exemple, le système (S) est constituée d'une particule de spin 1/2 plongée dans un champs magnétique $\vec{B} = B_0\ \vec{u_z}$. Ce spin est responsable d'un moment magnétique $\vec{\mu} = \gamma\ g\ \vec{S}$ qui est associé à une énergie $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$. Cette énergie devient l'Hamiltonien du système quantique, qu'on écrira $\widehat{H} = -\widehat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$. Cet Hamiltonien est semi-classique, car le champs $\vec{B}$ n'est pas remplacé par un opérateur puisque celui-çi est de nature classique. On obtient finalement :
$\widehat{H} = -B_0\ \widehat{\vec{\mu_z}} = -\gamma\ g\ B_0\ \widehat{S_z}$ avec $\widehat{S_z} = \frac{\hbar}{2}\ \widehat{\sigma_3}$ ce qui s'écrit aussi : $\widehat{H} = -\mu_0\ B_0\ \widehat{\sigma_3}$.

Prenons un autre exemple : pour une particule libre, l'énergie est donnée par $E = \frac{P^2}{2\ m}$, donc l'Hamiltonien serait $\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2\ m}$ où il ne reste plus qu'à déterminer l'opérateur quantité de mouvement $\widehat{P}$ puis à déterminer ses vecteurs et valeurs propres.

3.2 Étude de l'exemple

Considérons l'Hamiltonien $\widehat{H} = -\mu_0\ B_0\ \widehat{\sigma_3}$. On peut l'exprimer dans la base d'états propres $\{|+>_{z_0}, |->_{z_0}\}$ que nous choisissons à l'instant $t = 0$. On a donc :

$$\widehat{H}\ |+>_{z_0} = -\mu_0\ B_0\ |+>_{z_0} \quad et \quad \widehat{H}\ |->_{z_0} = \mu_0\ B_0\ |->_{z_0}$$

Nous avons déjà vu que l'évolution de ces états propres est donnée par :

$$|+>_{z(t)} = e^{\frac{\mu_0 B_0}{\hbar} t}\ |+>_{z_0} \quad et \quad |->_{z(t)} = e^{-\frac{\mu_0 B_0}{\hbar} t}\ |->_{z_0}$$

On peut ainsi donner l'évolution de n'importe quel état par combinaisons.
Par exemple, nous avions obtenu :

$$|+>_{x_0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ |+>_{z_0} + \frac{1}{\sqrt{2}}\ |->_{z_0} \quad et \quad |->_{x_0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ |+>_{z_0} - \frac{1}{\sqrt{2}}\ |->_{z_0}$$

Ce qui donne, en posant $\omega = \frac{\mu_0 B_0}{\hbar}$:

$$|+>_{x(t)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\ e^{\omega\ t}\ |+>_{z_0} + \frac{1}{\sqrt{2}}\ e^{-\omega\ t}\ |+>_{z_0}$$

On peut ensuite calculer les produits scalaires de cet état instantanné avec les vecteurs initiaux $|+>_{x_0}$ *et* $|->_{x_0}$ pris à l'instant $t = 0$. On obtient :

$$_{x_0}<-|+>_{x(t)}= i\sin\omega t \;\; et \;\; _{x_0}<+|+>_{x(t)}= \cos\omega t$$

Ce qui montre que l'état $|+>_x$ tourne dans le plan (xOy) à la pulsation ω.
La probabilité de trouver l'état $|+>_{x(t)}$ dans l'état $|+>_{x_0}$ à l'instant t est $|\cos\omega t|^2$, et celle de le trouver dans l'état $|->_{x_0}$ est $|i\sin\omega t|^2$.