



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE : Master

Filière : Physique
Option : Physique des Matériaux

THÈME :

La résolution de problèmes de mécanique
quantique avec
Hamiltonien dépendant explicitement du
temps

Préparé par : Aniba Aicha

Soutenu le : 02/07/2018

Devant le jury :

Président :	Latrache Abdelhakim	MCA	Université de BBA
Rapporteur 1 :	Berrehail Mounira	MAA	Université de BBA
Rapporteur 2 :	Benchiheub Nadjat	MAA	Université de BBA
Examineur :	Labгаа Noudjoud	MCB	Université de BBA
Examineur :	Mameri Samir	MCB	Université de BBA

Année universitaire : 2017/2018

Remerciements

Je remercie Dieu tout puissant de m'avoir donné le courage, la santé, la patience jusqu'à l'achèvement de ce mémoire.

Je remercie particulièrement à mon encadreur Berrehail Mounira pour nous avoir guidé grâce à ses précieux conseils et ses encouragements lors de la réalisation de ce mémoire.

Je remercie aussi les membres de jury d'avoir accepté de juger ce modeste travail.

Mes remerciements vont aussi à tous les enseignants de département de physique de l'université de Bordj bou arreridj et tous ceux qui ont contribué de près ou de loin, à notre formation scientifique.

Dédicace

*Je remercie le Bon-Dieu pour m'avoir donné la force
d'accomplir ce travail pour aller plus loin In Chaa
Allah.*

*Je dédie ce travail à mes parents, pour leurs encouragement
et leurs aide, et soutien et surtout les sacrifices qu'ils ont
fait pour nous voir réussir.*

Je le dédie aussi à mes frères et sœurs

A toute ma grande Famille Aniba

*A tous ceux et celles qui m'ont aidé et encouragé de
près comme de loin, parmi eux;*

Sadok Amida et Rizoug Fatima.

*Un grand merci également à A. Ferahtia qui m'a aidé et
setenu et son lui je ne pourrait rien faire.*

Enfin a tous mes amis et mes professeurs sans exception.

Aicha

Table des matières

<i>N°</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
Introduction générale		1
Chapitre I : Equation de Schrödinger dépendante du temps		
I.1	Brève présentation de la mécanique quantique.	3
I.2	Equation de Schrödinger dépendante du temps.	3
I.2.1	Superposition d'états.	4
I.2.2	Evolution temporelle d'un système quantique.	4
I.2.3	Incertitudes. Mesure d'un état quantique.	5
I.3	Méthodes exactes pour la résolution de l'équation de Schrödinger.	6
I.3.1	Opérateur d'évolution.	6
I.3.2	Méthode des transformations unitaires.	7
I.3.3	Méthode des invariants.	7
Chapitre II : La théorie des invariant et La transformation unitaire		
La théorie des invariant		
II.1	Introduction.	8
II.2	La méthode des invariants.	8
II.2.1	Exposition de la méthode.	9
II.2.2	Valeurs propres de $I(t)$.	9
II.2.3	Vecteurs propres de $I(t)$.	10
II.3.4	La phase totale.	11
II.3.5	Solution générale de l'équation de Schrödinger.	12
II.3	La transformation unitaire	12
II.3.1	Introduction.	12
II.3.2	propriétés générales des opérateurs unitaires.	12
II.3.3	Opérateur unitaire et changement de base.	13
II.3.4	Transformation de l'hamiltonien et du vecteur d'état.	14
II.4	Transformation des observables.	14

II.4.1	Remarque.	15
Chapitre III : Application de La théorie des invariant		
III.1	Introduction.	16
III.2	Operateur Hamiltonien et construction de l'invariant.	16
III.3	Valeurs et états propres de l'invariant.	19
III.4	Calcul de la phase total et la solution de l'équation de Schrödinger.	23
III.5	Conclusion générale.	
III.6	Référence.	

Introduction générale

Introduction :

La mécanique quantique est la branche qui a pour but d'étudier et décrire des phénomènes physiques. Elle est fondamentale dans pratiquement tous les domaines de la physique dès qu'on s'intéresse à des dimensions microscopiques de l'ordre du diamètre d'un atome, elle a permis de comprendre des nombreux phénomènes qui étaient sans explication. La mécanique quantique a été établie essentiellement entre 1900 et 1927 par Bohr, Dirac, De Broglie, Heisenberg, Gordan, Pauli et Schrödinger, sachant en mécanique classique (loi de Newton) l'état d'un système physique est donné par la résolution des équations du mouvement du système. Par contre, en mécanique quantique l'état du système est déterminé par la résolution de l'équation de Schrödinger.

L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en mécanique quantique car c'est elle qui régit l'évolution dans le temps du système physique. Depuis la publication des travaux de Schrödinger [1], les physiciens théoriciens se sont penchés à trouver des solutions analytiques à l'équation de Schrödinger pour différents systèmes physiques. A partir de cette solution, on obtient une fonction d'onde qui nous permet d'identifier le système quantique étudié. Pour les systèmes indépendants du temps (stationnaires), on sépare les variables (temps, espace), et on obtient ainsi l'équation de Schrödinger stationnaire, qui a été résolue seulement pour quelques systèmes simples (oscillateur harmonique, particule libre, atome d'Hydrogène,...) [2,3], et la plus part des autres cas sont restés sans solutions, n'ont été résolus que par des méthodes numériques. Cependant pour les systèmes dépendant du temps on utilise les méthodes approximatives comme méthodes de perturbation, et dont l'application était très limitée, ce qui a poussé les physiciens à proposer plusieurs méthodes et techniques différentes pour étudier les systèmes physiques dont l'Hamilton dépend des paramètres variant en fonction du temps.

La théorie des invariants a été introduite par Lewis et Riesenfeld (1969) [4], représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendants du temps, cette méthode est basée sur la construction d'un opérateur hermitien qui représente l'invariant $I(t)$ et la dérivation de la relation entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger. L'importance de la théorie des invariants se figure dans le langage mathématique puissant et son efficacité dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Dans cette mémoire, on va résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps pour le potentiel linéaire dépendant du temps [5] $v(t) = q(E_0 + E_1 \cos(\omega t + \phi_0))$.

On va d'abord rappeler, au premier chapitre : L'équation de Schrödinger dépendant du temps avec ses méthodes exactes de solution.

Le deuxième chapitre est consacré à la solution de l'équation de Schrödinger par la méthode des invariants et les transformations unitaires.

Le chapitre 3 est consacré à la présentation détaillée de la résolution du problème d'une particule chargée, placée dans un champ électrique uniforme à une dimension et dépendant du temps. Nous utilisons la méthode décrite dans le chapitre 2. Ou l'invariant utilise est un opérateur quadratique à la fois par rapport aux opérateurs position et impulsion. Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion générale.

Chapitre I

Equation de Schrödinger dépendant des temps

I.1 Brève présentation de la mécanique quantique

La mécanique quantique est née au début du XXe siècle de l'étude de l'interaction lumière-matière. En a émergé une physique très riche, s'appliquant rapidement à une grande variété des systèmes, des particules subatomiques aux étoiles, la physique atomique et la physique du solide des semi-conducteurs aux nanotechnologie en passant par l'imagerie médicale à résonance magnétique jusqu'à l'informatique quantique, autant de découvertes au service de l'humanité .

Venue au monde au début des années vingt pour mettre définitivement fin à la crise qu'a connu la physique dès la fin du 19 siècle, marqué par l'impuissance et l'échec de la physique classique dans la description et la compréhension des phénomènes atomiques et subatomiques .Il nous est impossible de parler de mécanique quantique sans évoquer l'équation de Schrödinger, l'équation la plus fondamentale de la physique. Elle fut conçue en 1925 par Erwin Schrödinger, c'est l'équation d'évolution dans le temps d'une fonction de carrée sommable, dite fonction d'onde, qu'on doit associer à toute particule matérielle selon l'hypothèse de Louis de Broglie, auteur du double aspect de la matière : « onde-corpuscule ». Plus de détails peuvent être trouvé dans l'ouvrage [2].

I.2 Equation de Schrödinger dépendante du temps

La mécanique quantique postule qu'à un instant t_0 fixé, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un ket (vecteur d'état) appartenant à l'espace des états d'Hilbert [2]. En outre l'évolution dans le temps du vecteur d'état est régie par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = H(t) \psi(\vec{r}, t) , \quad (\text{I.1})$$

Où $H(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système. Celle-ci peut dépendre explicitement du temps.

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m(t)} \Delta + U(r, t). \quad (\text{I.2})$$

Avec $p = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$, où $\vec{\nabla}$ est l'opérateur gradient et $U(r, t)$ étant l'opérateur d'énergie potentielle associée au potentiel d'interaction, éventuellement dépendant du temps.

Si le phénomène étudié est stationnaire, l'opérateur Hamiltonien correspondant ne dépend pas explicitement du temps. Dans ce cas, l'équation de Schrödinger (I.1) se réduit, après séparation des variables spatiales et du temps, à une équation aux valeurs propres stationnaire de la forme

$$H\psi(r) = E\psi(r) . \quad (\text{I.3})$$

Où E désigne l'énergie du système dans l'état stationnaire $\psi(r)$, représenté par la fonction d'onde $\psi(r)$.

L'équation de Schrödinger s'applique à la physique atomique et moléculaire, et notamment à tous les calculs de la spectroscopie.

I.2.1 Superposition d'états

Puisque l'équation de Schrödinger est linéaire, il est évident alors que la somme de deux solutions ou plus est aussi une solution. De là découle le principe de superposition, qui est l'un des principes fondamentaux de la mécanique quantique, qui stipule qu'un système quantique pouvant exister dans des états discrets $|\psi_n(t)\rangle$ ($n \in \mathbb{N}$) peut également occuper l'état superposé

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n |\psi_n(t)\rangle , \quad (\text{I.4})$$

Où les a_n sont des coefficients complexes indépendants du temps, pourvu que la condition de normalisation, qui s'écrit dans la notation de Dirac comme

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 , \quad (\text{I.5})$$

Soit satisfaite.

L'intérêt de ce principe réside dans le fait qu'un choix adéquats des coefficients a_n permet de choisir la solution physique qui satisfait les conditions aux limites requises pour le problème étudié.

I.2.2 Evolution temporelle d'un système quantique

On postule que l'évolution temporelle d'un système quantique [2] est linéaire de sorte qu'il existe un opérateur $U(t, t_0)$ de l'espace de Hilbert H appelé opérateur d'évolution tel que

$$\psi(\vec{r}, t) = U(t, t_0)\psi(\vec{r}, t_0) , \quad (\text{I.6})$$

Par ailleurs, afin d'assurer la normalisation de la fonction d'onde, l'opérateur d'évolutions doit être unitaire

$$U^+(t, t_0) U(t, t_0) = I, \quad (\text{I.7})$$

Où I est l'opérateur identité.

La définition (I.6) permet de montrer que l'équation de Schrödinger est également satisfaite par l'opérateur d'évolution

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) , \quad (\text{I.8})$$

Le calcul exact de l'opérateur $U(t, t_0)$ dans le cas où l'hamiltonien dépend du temps est en général impossible, hormis quelques cas simples mais exemplaires, et on recourt le plus souvent aux méthodes de perturbation. En revanche, si H est constant, on a :

$$U(t, t_0) = e^{\frac{1}{i\hbar}H(t-t_0)} \quad . \quad (\text{I.9})$$

I.2.3 Incertitudes. Mesure d'un état quantique

A chaque grandeur physique susceptible d'être mesurée est associée un opérateur linéaire hermitien A agissant dans l'espace de Hilbert et appelé observable. Les résultats possibles de la mesure de A sont les valeurs propres de l'observable. La probabilité de trouver la valeur α lors d'une mesure de A effectuée sur un système dans l'état quelconque $|\psi(t)\rangle$ est alors

$$P(\alpha) = |\langle \alpha | \psi(t) \rangle|^2, \quad (\text{I.10})$$

Où $|\alpha\rangle$ est le vecteur propre de A , associé à la valeur propre α .

D'après le principe d'incertitude de Heisenberg [2] il existe des grandeurs qui ne peuvent pas être déterminées simultanément avec une précision finie, et leur mesure modifie l'état du système. C'est le cas de la position et de l'impulsion d'une particule, plus on augmente la précision sur la mesure de position, plus on perturbe la vitesse, et réciproquement. Plus précisément, si on définit les incertitudes sur ces mesures par les écarts-types Δx et Δp , ils devront satisfaire l'inégalité de Heisenberg

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (\text{I.11})$$

Et de même pour les composantes sur les axes y et z , les Δ sont maintenant parfaitement définis, et désignent précisément les écarts-types

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}, \quad (\text{I.12})$$

$$\Delta y = \sqrt{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}, \quad (\text{I.13})$$

Où $\langle \cdot \rangle$ désigne la valeur moyenne dans un état du système. Par exemple, dans l'état $|\psi(t)\rangle$ supposé normalisé, d'un système évoluant à une dimension, les valeurs moyennes des puissances de x et p , se calculent par :

$$\langle x \rangle = \int \psi(x, t)^* x \psi(x, t) dx, \quad (\text{I.14})$$

$$\langle p \rangle = \int \psi(x, t)^* p \psi(x, t) dx. \quad (\text{I.15})$$

Généralement, il existe très peu de systèmes physiques d'ont on sait résoudre exactement leurs équations de Schrödinger et notamment lorsqu'il s'agit de systèmes régis par des hamiltoniens dépendant explicitement du temps.

Dans ce cas, il existe maintenant différentes techniques, pour résoudre l'équation de Schrödinger dans des cas relativement simples, principalement à une dimension. Parmi ces techniques, il existe des méthodes approximatives et des approches exactes.

I.3 Méthodes exactes pour la résolution de l'équation de Schrödinger

I.3.1 Opérateur d'évolution

Comme nous l'avons déjà évoqué, la méthode standard pour obtenir des solutions exactes de l'équation de Schrödinger repose essentiellement sur l'obtention de l'opérateur d'évolution, satisfaisant à l'équation (I.8). Lorsque l'Hamiltonien dépend explicitement du temps, cette équation peut être intégrée formellement entre t_0 et t et mise sous la forme

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) U(t_1, t_0), \quad (I.16)$$

En itérant cette relation une fois, on peut écrire

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 H(t_1) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 H(t_1) H(t_2) U(t_2, t_0) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 H(t_1) H(t_2) H(t_3) U(t_3, t_0) + \dots \quad (I.17)$$

Et si l'itération est répétée un nombre infini de fois, on aboutit à l'écriture

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) \dots H(t_n), \quad (I.18)$$

En introduisant l'opérateur de produit chronologique, défini par

$$T[H(t_1) \dots H(t_n)] = H(t_{p_1}) \dots H(t_{p_n}), \text{ si } t_{p_1} > t_{p_2} > \dots > t_{p_n}, \quad (I.19)$$

Où p est une permutation quelconque de $1, \dots, n$ l'expression de $U(t, t_0)$ se ramène à

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T[H(t_1) \dots H(t_n)], \quad (I.20)$$

Qu'on écrit formellement sous la forme

$$U(t, t_0) = 1 + T\left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t) dt\right). \quad (I.21)$$

En fait, si dans le cas particulièrement simple où l'Hamiltonien H ne dépend pas du temps, l'opérateur $U(t, t_0)$ se ramène à la forme (I.9).

I.3.2 Méthode des transformations unitaires

Lorsqu'on effectue une transformation physique sur l'appareillage pendant une expérience sur un système, et que le résultat demeure inchangé, on dit que le système étudié est invariant sous cette transformation. Le traitement de cette transformation en mécanique quantique requiert que celle-ci soit une transformation unitaire [1]. Cette condition est essentielle pour que l'observable c'est à dire la valeur moyenne d'un opérateur, reste la même. En appliquant des transformations unitaires sur un système dépendant du temps on peut le rendre indépendant du temps, à condition de trouver de tels opérateurs unitaires. dans laquelle ces systèmes sont transformés en des systèmes indépendants du temps. A cause de son importance dans ce travail, nous allons l'étudier avec plus de détails.

I.3.3 Méthode des invariants

La théorie des invariants représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendant du temps [4]. Cette importance de la théorie des invariants relie au langage mathématique puissant qui l'a caractérisé, et sur sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. L'idée de base de la théorie des invariants est la dérivation d'une relation simple entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation Schrödinger.

L'utilisation de la théorie des invariants de Lewis-Riesenfeld dépendants explicitement du temps en théorie quantique a été faite pour la première fois sur l'oscillateur harmonique de fréquence dépendante du temps et sur une particule chargée dans un champ électromagnétique [4]. A cause de son importance dans ce travail, on va l'étudier avec plus de détails dans le chapitre 2.

Chapitre II

*La théorie des invariant et
La transformation unitaires*

II.1.Introduction

Depuis l'introduction de l'équation fondamentale de la mécanique quantique par Schrödinger, on n'a pas cessé d'essayer de lui trouver des méthodes de résolution adéquates. De nos jours plusieurs techniques existent, chacune peut être mieux adaptées à une situation particulière. La méthode des invariants, qui fut établie par Lewis --Riesenfeld en 1969 [4] pour résoudre le problème d'un oscillateur harmonique quantique de fréquence dépendante du temps et le problème d'une particule chargée dans un champs électromagnétique dépendant du temps . Elle s'applique principalement dans les problèmes à une ou deux dimensions. Cette étude a révélé une relation simple entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger .L'autre technique, très utilisée dans la résolution de l'équation de Schrödinger, dépendant du temps, la méthode de transformation unitaire [6] qui a été utilisée avec succès pour résoudre une multitude de potentiels connus en physique. L'avantage de cette technique est qu'il est possible de choisir convenablement un opérateur unitaire de telle sorte que la nouvelle équation soit facile à résoudre.

Nous allons présenter dans cette section plus ou moins en détails les différentes étapes de ces deux méthodes.

II.2 La méthode des invariants

La théorie des invariants représente l'un des piliers fondamentaux dans l'étude des systèmes dépendant du temps. Cette importance de la théorie des invariants est reliée au langage mathématique puissant qui la caractérise, et à sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps. Dans cette partie de notre travail, on va donner quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants telle qu'elle a été introduite par Lewis et Riesenfeld [4] dans le cas du spectre discret. Á travers ces notions on peut, au moins, donner aux lecteurs une idée sur l'importance de la théorie des invariants pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps.

L'idée de base de la théorie des invariants est la dérivation d'une relation entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger. On peut trouver une transformation de phase dépendant du temps pour chaque état propre d'un invariant telle que la fonction propre devient une solution particulière de l'équation (I.1), la phase correspondante est déterminée en résolvant une simple équation différentielle du premier ordre.

II.2.1 Exposition de la méthode

On considère un système physique décrit par un Hamiltonien $H(t)$ [4] dépendant explicitement du temps et on suppose l'existence d'un autre opérateur hermitien qui dépend explicitement du temps $I(t)$.

L'opérateur $I(t)$ est invariant lorsqu'il satisfait la condition

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[I, H] = 0, \quad (\text{II.1})$$

tel que $I^+(t) = I(t)$. L'évolution au cours du temps de ce système est représentée par l'équation de Schrödinger (I.1).

La multiplication de l'équation (II.1) par le ket $|\psi(t)\rangle$ à droite et l'utilisation de l'équation de Schrödinger (I.1), nous permettra de déduire une relation importante

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (I|\psi(t)\rangle) = H(I|\psi(t)\rangle), \quad (\text{II.2})$$

qui signifie que l'action de l'opérateur invariant sur le vecteur d'état de Schrödinger est aussi solution de l'équation de Schrödinger. Ce résultat est valable quel que soit la forme de l'invariant.

II.2.2 Valeurs propres de $I(t)$

On va montrer que le vecteur d'état de l'invariant représente une solution de l'équation de Schrödinger, à cet effet on considère un opérateur invariant $I(t)$ hermitien ayant des valeurs propres λ avec des états propres $|\lambda, k\rangle$ qui forment une base de l'espace de Hilbert [4], le nombre k représente tous les nombres quantiques qui sont nécessaires à spécifier les états propres de l'invariant

$$I(t)|\lambda, k\rangle = \lambda|\lambda, k\rangle, \quad (\text{II.3})$$

$$\langle \lambda', k' | \lambda, k \rangle = \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{k' k}. \quad (\text{II.4})$$

Les valeurs propres λ sont réels et indépendantes du temps.

CHAPITRE II : La théorie des invariant et les transformations unitaires

La différentiation de l'équation (II.3) conduit à

$$\frac{\partial I}{\partial t}|\lambda, k\rangle + I\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k\rangle = \frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k\rangle + \lambda\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k\rangle . \quad (\text{II.5})$$

En multipliant l'équation (II.1) par le ket $|\lambda, k\rangle$ on obtient

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k\rangle + IH|\lambda, k\rangle - HI|\lambda, k\rangle = 0 . \quad (\text{II.6})$$

Le produit scalaire de l'équation (II.6) par le vecteur d'état $\langle\lambda', k'|$

$$i\hbar\langle\lambda', k'|\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k\rangle + (\lambda' - \lambda)\langle\lambda', k'|H|\lambda, k\rangle = 0 , \quad (\text{II.7})$$

Implique que

$$\langle\lambda, k'|\frac{\partial I}{\partial t}|\lambda, k\rangle = 0 . \quad (\text{II.8})$$

Le produit scalaire de l'équation (II.5) avec le ket $|\lambda, k\rangle$ conduit à une expression qui exprime que la valeur propre de l'invariant est indépendante du temps :

$$\frac{\partial \lambda}{\partial t} = \langle\lambda, k|\frac{\partial I}{\partial t}|\lambda, k\rangle = 0 , \quad (\text{II.9})$$

Il est clair que les états propres de l'invariant peuvent dépendre du temps.

II.2.3 Vecteurs propres de I (t)

Dans le but de chercher la relation qui existe entre les états propres de l'invariant I et les solutions de l'équation de Schrödinger, on écrit tout d'abord l'équation d'évolution de l'état $|\lambda, k\rangle$, en utilisant les deux équations (II.5) et (II.9) :

$$(\lambda - I)\frac{\partial}{\partial t}|\lambda, k\rangle = \frac{\partial I}{\partial t}|\lambda, k\rangle , \quad (\text{II.10})$$

En multipliant (II.10) à droite par le bra $\langle\lambda', k'|$ et tenant en considération (II.7), pour éliminer le terme $\langle\lambda', k'|\frac{\partial I}{\partial t}|\lambda, k\rangle$ On obtient :

$$i\hbar(\lambda - \lambda') \langle \lambda', k' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k \rangle = (\lambda - \lambda') \langle \lambda', k' | H | \lambda, k \rangle , \quad (\text{II.11})$$

et alors pour $\lambda' \neq \lambda$ on obtient

$$i\hbar \langle \lambda', k' | \frac{\partial}{\partial t} | \lambda, k \rangle = \langle \lambda', k' | H | \lambda, k \rangle , \quad (\text{II.12})$$

Si l'équation (II.11) était vérifiée aussi pour $\lambda' = \lambda$, on aurait pu en déduire immédiatement que $|\lambda, k\rangle$ est une solution de l'équation de Schrödinger. Pour obtenir un résultat pareil, on va utiliser le fait que les phases des états stationnaires $|\lambda, k\rangle$ ne sont pas fixées. On peut donc très bien multiplier $|\lambda, k\rangle$ par un facteur de phase dépendant du temps

$$|\lambda, k\rangle_{\alpha} = \exp(i\alpha_{\lambda k}(t)) |\lambda, k\rangle . \quad (\text{II.13})$$

II.2.4 La phase totale

Nous avons vu que la fonction d'onde du système, peut être cherché, à une phase globale près sous la forme d'un produit de deux fonctions chacune est relative à une variable

Dans l'approche de Reisenfeld [4] nous supposons que le vecteur $|\lambda, k\rangle$ est multiplié par un facteur arbitraire dépendant du temps. Alors, on peut définir un nouveau ensemble de vecteurs propres de l'invariant $I(t)$ défini par

$$|\lambda, k\rangle_{\alpha} = \exp(i\alpha_{\lambda k}(t)) |\lambda, k\rangle , \quad (\text{II.14})$$

Où $\alpha_{\lambda k}(t)$ est une fonction réelle de temps arbitrairement choisie. Ces $|\lambda, k\rangle_{\alpha}$ sont des états propres orthonormales de $I(t)$ associés à λ , aussi bien que les $|\lambda, k\rangle$. si on choisit bien les phases $\alpha_{\lambda k}(t)$ l'équation (II.12) sera vérifiée pour $\lambda' = \lambda$ et donc l'objectif sera atteint. Il faut juste avoir

$$\hbar \delta_{\lambda' \lambda} \dot{\alpha}_{\lambda k}(t) = \langle \lambda, k' | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, k \rangle . \quad (\text{II.15})$$

Cela nous oblige, d'avoir bien choisi les $|\lambda, k\rangle$, telles que les deuxièmes termes de ces égalités s'annulent, pour $k \neq k'$. Cette diagonalisation est toujours possible car l'opérateur

CHAPITER II : La théorie des invariant et les transformations unitaires

$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H)$ est hermitien. Une fois que cette diagonalisation est effectuée la phase $\alpha_{\lambda k}(t)$ doit vérifier une simple équation

$$\hbar \dot{\alpha}_{\lambda k}(t) = \langle \lambda, k | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H | \lambda, k \rangle. \quad (\text{II.16})$$

II.2.5 Solution générale de l'équation de Schrödinger

En utilisant ces résultats [4], on peut dire que la solution générale de notre équation de Schrödinger est donnée par

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k} \exp(i\alpha_{\lambda k}(t)) |\lambda, k, t\rangle, \quad (\text{II.17})$$

tel que les $C_{\lambda k}$ sont des coefficients indépendants du temps.

II.3 Les transformations unitaires

II.3.1 Introduction

Il est important de se rappeler que pour décrire l'évolution du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ dans l'espace de Hilbert, on doit choisir un système d'axes ou un référentiel. Le choix de référentiel n'a pas de raison d'être unique, c'est-à-dire que l'on est libre de passer à un autre système d'axes. Chaque fois que l'on change de référentiel, on change de point de vue et par conséquent on observe le système physique sous un angle différent. En pratique, pour passer d'un référentiel à un autre, on utilise des opérateurs unitaires T qui peuvent être indépendants ou dépendants du temps.

II.3.2 propriétés générales des opérateurs unitaires

a. Définition

Un opérateur T est unitaire si son inverse T^{-1} est égal à son adjoint T^{\dagger}

$$TT^{\dagger} = T^{\dagger}T = I \quad (\text{II.18})$$

Où T^{\dagger} est l'opérateur adjoint de T . Généralement, pour un hamiltonien dépendant du temps, on utilise des opérateurs unitaires dépendants du temps qui transforment le vecteur d'état de la façon suivante :

CHAPITER II : La théorie des invariant et les transformations unitaires

$$|\psi'(t)\rangle = T|\psi(t)\rangle \quad (\text{II.19})$$

b. propriétés

Considérons deux vecteurs quelconques $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ de l'espace et leurs transformés $|\tilde{\psi}_1\rangle$ et $|\tilde{\psi}_2\rangle$ sous l'action de T :

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}_1\rangle &= T|\psi_1\rangle \\ |\tilde{\psi}_2\rangle &= T|\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (\text{II.20})$$

Calculons le produit scalaire $\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle$ nous obtenons :

$$\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle = \langle \psi_1 | T^+ T | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \quad (\text{II.21})$$

La transformation unitaire associée à l'opérateur T conserve donc le produit scalaire dans l'espace cette propriété est d'ailleurs caractéristique d'un opérateur unitaire.

Le produit de deux opérateurs unitaires est aussi unitaire. En effet ; si T et V sont unitaires ;

on a

$$\begin{aligned} TT^+ &= T^+T = I \\ VV^+ &= V^+V = I \end{aligned} \quad (\text{II.22})$$

Calculons alors

$$\begin{aligned} (TV)^+(TV) &= V^+T^+TV = V^+V = I \\ (TV)(TV)^+ &= TVV^+T^+ = T^+T = I \end{aligned} \quad (\text{II.23})$$

Ces égalités montrent bien que l'opérateur produit TV est unitaire. Cette propriété était d'ailleurs prévisible ; lorsque deux transformations conservent le produit scalaire ; l'application successive de ces deux transformations le conservent également.

II.3.3 Opérateur unitaire et changement de base

Considérons $\{|v_i\rangle\}$ une base orthonormée de l'espace des états ; Appelons $\{|\tilde{v}_i\rangle\}$ le transformé du vecteur sous l'action de l'opérateur T :

$$|\tilde{v}_i\rangle = T|v_i\rangle \quad (\text{II.24})$$

L'opérateur T étant unitaire, nous avons

$$\langle \tilde{v}_i | \tilde{v}_j \rangle = \langle v_i | v_j \rangle = \delta_{ij} \quad (\text{II.25})$$

Donc on peut dire que les vecteurs $|\tilde{v}_i\rangle$ sont orthonormés ; et qu'ils constituent une base dans l'espace des états.

II.3.4 Transformation de l'hamiltonien et du vecteur d'état

Nous allons montrer dans ce paragraphe qu'un problème physique décrit par l'hamiltonien \hat{H} et le vecteur d'état $|\psi\rangle$ admet de multiples représentations équivalentes, obtenues échangeant à la fois l'hamiltonien et le vecteur d'état.

Généralement, pour un hamiltonien dépendant du temps, on utilise des opérateurs unitaires dépendants du temps qui transforment le vecteur d'état de la façon suivante :

$$|\psi'(t)\rangle = T|\psi(t)\rangle \quad (\text{II.26})$$

Notons d'abord que $|\psi'(t)\rangle$ tout comme $|\psi(t)\rangle$ est de norme 1 puisque la transformation T(t) est unitaire :

$$\langle \psi'(t) | \psi'(t) \rangle = \langle \psi(t) | T^\dagger T | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 \quad (\text{II.27})$$

Cherchons quel doit être l'hamiltonien H(t) pour que le vecteur d'état $|\psi'(t)\rangle$ décrive la même situation que $|\psi(t)\rangle$, évoluant sous l'action de $H'(t)$. Partant de l'équation (II.26), nous obtenons

$$H'(t) = T(t)H(t)T^\dagger(t) + i\hbar \frac{dT(t)}{dt} T^\dagger \quad (\text{II.28})$$

Le but général d'un changement de référentiel est de trouver une représentation dans laquelle l'évolution temporelle du système physique paraît la plus simple. Souvent, un changement de représentation peut nous apporter de nouvelles interprétations physiques ou des avantages techniques. On applique des transformations unitaires sur un système dépendant du temps pour le rendre indépendant du temps, à condition de trouver de tels opérateurs unitaires.

II.4 Transformation des observables

Considérons une observable \hat{G} dans la représentation initiale. $\langle G \rangle = |\psi(t)\rangle | \hat{G} | \psi(t)\rangle$ doit être indépendante de la représentation. Elle s'écrit dans le nouveau point de vue à l'aide de l'équation (II.26)

$$\langle G \rangle = |\psi'(t)\rangle \hat{T}(t) \hat{G} \hat{T}^+(t) \psi'(t)\rangle \quad (\text{II.29})$$

Il s'ensuit que dans la nouvelle représentation, la quantité physique associée à \hat{G} est décrite par l'opérateur

$$\hat{G}' = \hat{T}(t) \hat{G} \hat{T}^+(t) \quad (\text{II.30})$$

Dans le cas d'une particule matérielle, \hat{G} pourra être l'opérateur position \hat{r} ou l'opérateur vitesse \hat{v} .

Si \hat{T} ne commute pas avec \hat{r} on prendra garde que dans la nouvelle représentation l'opérateur position ne coïncide pas avec l'opérateur « multiplication par \hat{r} ».

II.4.1 Remarque

Dans le cas où la transformation unitaire s'écrit

$$\hat{T}(t) = \exp \frac{i}{\hbar} \hat{F}(t) \quad (\text{II.31})$$

Avec $\hat{F}(t)$ commutant avec $\frac{\partial \hat{F}(t)}{\partial t}$, l'expression (II.31) de l'hamiltonien dans le nouveau point de vue prend la forme simple :

$$\hat{H}' = \hat{T}(t) \hat{H} \hat{T}^+(t) - \frac{\partial \hat{F}(t)}{\partial t} \quad (\text{II.32})$$

CHAPITER II : La théorie des invariant et les transformations unitaires

Chapitre III

Application de la théorie des invariants

III.1 Introduction

Nous allons nous intéresser dans ce chapitre à la résolution de l'équation de Schrödinger par l'approche des invariants, initiée par Lewis-Riesenfeld [4], pour l'Hamiltonien d'une particule neutre, soumise à une force extérieure unidimensionnelle, uniforme dans l'espace et variable dans le temps [7].

Le but du travail de ce chapitre est de présenter la méthode des invariants pour résoudre l'équation de Schrödinger d'une particule soumise à une force extérieure dépendante du temps à une dimension, on a utilisé un opérateur invariant quadratique en x et p , Nous nous intéressons spécialement au cas où le l'invariant $I(t)$ est de la forme la plus générale

$$I(t) = \alpha(t) p^2 + \beta(t) x^2 + \gamma(t)(xp + px) + \delta(t)x + \rho(t)p + C(t),$$

Nous allons suivre deux démarches différentes afin de donner les solutions exactes de ce problème. La première est basée sur la technique des invariants de Lewis-Riesenfeld [4], L'autre méthode consiste à transformer l'invariant trouver en une forme standard de telle sorte que le nouveau invariant soit facile à résoudre, en utilisant une série de transformations unitaires.

III.2 Operateur Hamiltonien et construction de l'invariant

Considérons maintenant une particule dans un champ homogène décrite par l'Hamiltonien suivant [8]

$$H(t) = \frac{p^2}{2m} + v(t)x, \quad (\text{III.1})$$

Avec

$$v(t) = q(E_0 + E_1 \cos(\omega t + \phi_0)). \quad (\text{III.2})$$

Le traitement quantique du problème est basé, d'après les règles de quantification et le principe de Heisenberg, par des observables X et P , auxquelles correspondent des opérateurs \tilde{x} et \tilde{p} vérifiant la relation de commutation

$$[\tilde{x}, \tilde{p}] = i\hbar \quad (\text{III.3})$$

Dans le cadre de la mécanique quantique non relativiste, l'évolution du système dans le temps est caractérisée par l'évolution de la fonction d'onde $\psi(x, t)$, régie par l'équation

Schrödinger qui s'écrit dans la représentation position sous la forme

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m} + v(t)x \right) \psi(x,t), \quad (\text{III.4})$$

Avec : $p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

Afin d'étudier le mouvement quantique de notre système nous devons résoudre l'équation de Schrödinger (III.4), suivant la méthode des invariants de Lewis et Reisenfeld [4], on considère donc un opérateur invariant quadratique sous la forme la plus générale

$$I(t) = \alpha(t)p^2 + \beta(t)x^2 + \gamma(t)(xp + px) + \delta(t)x + \rho(t)p + C(t), \quad (\text{III.5})$$

où les fonctions $\alpha(t)$, $\beta(t)$, $\gamma(t)$, $\delta(t)$, $\rho(t)$ et $C(t)$ sont des fonctions réelles du temps qui seront choisies de telle sorte à satisfaire l'équation de l'invariant

$$\frac{\partial I(t)}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [I(t), H(t)], \quad (\text{III.6})$$

En tenant compte de la relation de commutation (III.3), il vient que

$$\begin{aligned} \frac{1}{i\hbar} [I, H] &= \frac{2\gamma(t)}{m} p^2 - 2\gamma(t)v(t)x + \frac{\beta(t)\hbar}{m} (xp + px), \\ &+ \left(\frac{\delta}{m} - 2\alpha(t)v(t) \right) p - \rho(t)v(t) \end{aligned} \quad (\text{III.7})$$

Par ailleurs, on a :

$$i\hbar \frac{\partial I(t)}{\partial t} = \dot{\alpha}(t)p^2 + \dot{\beta}(t)x^2 + \dot{\gamma}(t)(xp + px) + \dot{\delta}(t)x + \dot{\rho}(t)p + \dot{C}(t), \quad (\text{III.8})$$

En insérant les deux équations (III.7) et (III.8) dans (III.6) et identifiant les termes semblables entre les deux membres, on obtient le système d'équations différentielles linéaires couplées suivant :

$$\dot{\alpha}(t) = -\frac{2\gamma}{m}, \quad (\text{III.9.a})$$

$$\dot{\beta}(t) = 0, \quad (\text{III.9.b})$$

$$\dot{\gamma}(t) = -\frac{B}{m}, \quad (\text{III.9.c})$$

$$\dot{\delta}(t) = 2\gamma v(t), \quad (\text{III.9.d})$$

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{\delta}{m} + 2\alpha v(t), \quad (\text{III.9.e})$$

$$\dot{C}(t) = \rho v(t), \quad (\text{III.9.f})$$

Après intégrations, on obtient les solutions générales des équations (III.10) comme suit

$$\beta(t) = \beta_0, \quad (\text{III.10.a})$$

$$\gamma(t) = \gamma_0 - \frac{B_0}{m} t, \quad (\text{III.10.b})$$

$$\alpha(t) = \alpha_0 - 2\frac{\gamma_0}{m} t + \frac{B_0}{m^2} t^2, \quad (\text{III.10.c})$$

$$\delta(t) = \delta_0 + 2\gamma(t)v_1 + \frac{2B_0}{m} v_2, \quad (\text{III.10.d})$$

$$\rho(t) = \rho_0 - \frac{\delta_0}{m} t + 2\alpha(t)v_1 + \frac{2\gamma(t)}{m} v_2, \quad (\text{III.10.e})$$

$$C(t) = C_0 + \left(\rho_0 - \frac{\delta_0}{m} t \right) v_1 + \alpha(t) v_1^2 + \frac{\delta_0}{m} v_2 + \frac{2\gamma(t)}{m} v_1 v_2 + \frac{B_0}{m^2} v_2^2, \quad (\text{III.10.f})$$

Avec

$$v_1 = \int_0^t v(\tau) d\tau \quad (\text{III.11})$$

$$v_2 = \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau v(\tau) \quad (\text{III.12})$$

Les coefficients initiaux sont des paramètres réels qui seront fixés par les conditions physiques initiales du système.

III.3 Valeurs et états propres de l'invariant

On cherche les états propres de $I(t)$ correspondant à des valeurs propres réelles et indépendantes du temps

$$I(t)\varphi_\lambda(x,t) = \lambda\varphi_\lambda(x,t) , \quad (\text{III.13})$$

Pour accomplir ce but, procédons par une transformation unitaire dont le but est de réduire l'équation (III.13) en une nouvelle équation complètement indépendante du temps.

Considérons donc la transformation unitaire définie par

$$\varphi_\lambda(x,t) = U(t)\bar{\varphi}_\lambda(x) , \quad (\text{III.14})$$

Où $U(t)$ est un opérateur unitaire, $U^+(t)U(t) = U(t)U^+(t) = 1$, qu'on doit déterminer, et $\bar{\varphi}_\lambda(x)$ est une fonction indépendante du temps. En reportant (III.14) dans (III.13), on obtient la nouvelle équation

$$\bar{I}\bar{\varphi}_\lambda(x) = \lambda\bar{\varphi}_\lambda(x) , \quad (\text{III.15})$$

Où \bar{I} est le transformé de l'opérateur invariant $I(t)$ donné par

$$\bar{I} = U^+(t)I(t)U(t) . \quad (\text{III.16})$$

L'objectif est alors de fixer $U(t)$ de telle sorte que \bar{I} ne dépende pas explicitement du temps et qu'il soit à priori le plus simple possible. Pour ce faire, choisissons $U(t)$ sous la forme

$$U(t) = U_1(t)U_2(t)U_3(t) , \quad (\text{III.17})$$

Avec

$$U_1(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}B(t)x^2\right) , \quad (\text{III.18})$$

$$U_2 = \exp\left(i \frac{A_2(t)}{\hbar} x\right) \exp\left(i \frac{A_1(t)}{\hbar} p\right), \quad (\text{III.19})$$

Et

$$U_3 = \exp\left(i \frac{A_3(t)}{2\hbar} x\right) (xp + px), \quad (\text{III.20})$$

On peut montrer facilement que les opérateurs x et p se transforment sous l'action des opérateurs $U_i(t)$ comme suit

$$U_1^+(t) x U_1(t) = x, \quad (\text{III.21.a})$$

$$U_1^+(t) p U_1(t) = p - 2B(t)x, \quad (\text{III.21.b})$$

$$U_2^+(t) x U_2(t) = x - A_1(t), \quad (\text{III.21.c})$$

$$U_2^+(t) p U_2(t) = p + A_2(t), \quad (\text{III.21.d})$$

$$U_3^+(t) x U_3(t) = x \exp(-A_3(t)), \quad (\text{III.21.e})$$

$$U_3^+(t) p U_3(t) = p \exp(A_3(t)), \quad (\text{III.21.f})$$

En utilisant les relations (III.21) dans (III.16), l'invariant transformé $\bar{I}(t)$ sera donné par

$$\begin{aligned} \bar{I} = & \alpha(t) \exp(2A_3) p^2 + (\gamma - 2\alpha B)(xp + px) + (\beta + 4\alpha B^2 - 4B\gamma) \exp(-2A_3) x^2 \\ & + [(\delta - 2B\rho) + 2A_2(\gamma - 2\alpha B) - 2A_1(4\alpha B^2 - 4\gamma B + \beta)] \exp(-A_3) x \\ & + [\rho + 2\alpha A_2 - 2A_1(\gamma - 2\alpha B)] \exp(A_3) p + \alpha A_2^2 + A_1^2(4\alpha B^2 - 4\gamma B + \beta) \\ & - 2A_1 A_2(\gamma - 2\alpha B) - A_1(\delta - 2B\rho) + \rho A_2 + C. \end{aligned} \quad (\text{III.22})$$

On voit que $\bar{I}(t)$ semble plus compliqué que $I(t)$ mais il a l'avantage de dépendre de quatre paramètres libres, $B(t)$, $A_1(t)$, $A_2(t)$ et $A_3(t)$, qui peuvent être ajustés de telle sorte à simplifier sa forme par l'élimination des termes non désirés.

Tout d'abord fixons $A_3(t)$ et $B(t)$ par

$$A_3(t) = -\frac{1}{2} \ln \alpha(t), \quad (\text{III.23})$$

$$B(t) = \frac{\gamma(t)}{2\alpha(t)}, \quad (\text{III.24})$$

En reportant les relations (III.23) et (III.24) dans (III.22), le nouveau invariant $\bar{I}(t)$ sera réduit à la forme suivante

$$\begin{aligned} \bar{I} = & p^2 + (\alpha\beta - \gamma^2)x^2 + \sqrt{\alpha} \left[\left(\delta - \frac{\gamma}{\alpha} \rho \right) - 2A_1 \left(\beta - \frac{\gamma^2}{\alpha} \right) \right] x + \sqrt{\frac{1}{\alpha}} [\rho + 2\alpha A_2] p \\ & + \alpha A_2^2 + A_1^2 \left(\beta - \frac{\gamma^2}{\alpha} \right) - A_1 \left(\delta - \frac{\gamma}{\alpha} \rho \right) + \rho A_2 + C. \end{aligned} \quad (\text{III.25})$$

Fixons maintenant $A_1(t)$ et $A_2(t)$ de telle sorte que les coefficients de x et p dans (III.25) s'annulent identiquement. Ainsi, ils seront choisis sous la forme

$$A_1(t) = \frac{\alpha(t)\delta(t) - \gamma(t)\rho(t)}{2(\alpha(t)\beta(t) - \gamma^2(t))}, \quad (\text{III.26})$$

$$A_2(t) = -\frac{\rho(t)}{2\alpha(t)}, \quad (\text{III.27})$$

Avec le choix (III.26) et (III.27), l'invariant $\bar{I}(t)$ se réduit finalement à une forme plus simple, donnée par

$$\bar{I} = p^2 + \omega^2 x^2 + R(t), \quad (\text{III.28})$$

Avec

$$\omega^2 = \alpha(t)\beta(t) - \gamma^2(t), \quad (\text{III.29})$$

et

$$R(t) = -\frac{(\alpha\delta - \gamma\rho)^2}{4\alpha\omega^2} - \frac{\rho^2}{4\alpha} + C, \quad (\text{III.30})$$

Cependant, en se servant des relations (III.9) ou (III.10), il est facile de constater que ω^2 et R sont des quantités constantes.

Tel que

$$\omega^2 = \alpha_0 \beta_0 - \gamma_0^2, \quad (\text{III.31})$$

Tenant compte de (III.32), la dérivé de R par rapport au temps est donnée par

$$\dot{R} = \dot{C} + \frac{\dot{\alpha}}{4\alpha^2} \left[\frac{1}{\omega^2} (\alpha\delta - \gamma\rho)^2 + \rho^2 \right] - \frac{1}{2\alpha} \left[\dot{\rho}\rho + \frac{1}{\omega^2} (\alpha\delta - \gamma\rho) (\dot{\alpha}\delta + \alpha\dot{\delta} - \dot{\gamma}\rho - \gamma\dot{\rho}) \right]. \quad (\text{III.32})$$

En utilisant les relations (III.10), on montre alors que

$$\dot{R} \equiv 0, \quad (\text{III.33})$$

on voit bien que $\bar{I}(t)$ ne dépend pas explicitement du temps, et s'écrit sous la forme simple

$$\bar{I} = p^2 + \omega^2 x^2, \quad (\text{III.34})$$

qui ressemble donc, à une constante multiplicative près, à l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique de masse égale à 1.

Pour résoudre l'équation aux valeurs propres (III.16), on se propose de chercher des solutions $\bar{\varphi}_\mu(x)$ satisfaisant aux conditions aux limites $\bar{\varphi}_\mu(\pm\infty) = 0$: Ainsi, les fonctions propres de $\bar{I}(t)$ s'expriment en termes de la fonction de Gauss et des polynômes d'Hermite H_n sous la forme [1].

$$\bar{\varphi}_\mu(x) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} x\right) \quad (\text{III.35})$$

et les valeurs propres correspondantes λ sont discrètes et données par

$$\lambda = \lambda_n (2n+1)\hbar\omega \text{ avec } n \in \mathbb{N}. \quad (\text{III.36})$$

Afin d'obtenir les fonctions propres de l'opérateur invariant (III.6), utilisons (III.15), tout en tenant compte de (III.18) et {(III.19), (III.20), (III.21)}. En se servant des identités fondamentales suivantes

$$\exp\left[\frac{\alpha}{i\hbar}(xp_x + p_x x)\right] f(x) = e^{-\alpha} f(e^{-2\alpha} x), \quad (\text{III.37.a})$$

$$\exp\left(\frac{\alpha}{i\hbar} p_x\right) f(x) = f(x - \alpha), \quad (\text{III.37.b})$$

où $f(t)$ est une fonction arbitraire mais infiniment dérivable, on obtient formellement

$$\varphi_n(x, t) = e^{\frac{A_3(t)}{2}} \exp \frac{i}{\hbar} (A_2(t)x - B(t)x^2) \bar{\varphi}_n \left(e^{A_3(t)} (x - A_1(t)) \right). \quad (\text{III.38})$$

En reportant (III.24), (III.25) et (III.27), (III.28) dans (III.38), la fonction $\varphi_n(x, t)$ peut être mise sous la forme explicite suivante

$$\begin{aligned} \varphi(x) = & \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\alpha(t)\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{i}{2\alpha(t)\hbar}(\rho(t)x + \gamma(t)x^2)} \exp \left[-\frac{\omega}{2\hbar\alpha(t)} \left(x + \frac{1}{2\omega^2} \right) (\delta(t)\alpha(t) - \gamma(t)\rho(t))^2 \right] \\ & \times H_n \left(\sqrt{\frac{\omega}{\alpha(t)\hbar}} \left(x + \frac{1}{2\omega^2} (\delta(t)\alpha(t) - \gamma(t)\rho(t)) \right) \right), \end{aligned} \quad (\text{III.39})$$

où le pré facteur $\sqrt{((\omega / (\pi\alpha\hbar)))} (1 / \sqrt{2^n n!})$ est une constante de normalisation, la fonction d'onde $\varphi_n(x, t)$ est ainsi le produit d'un polynôme de Hermite de degré n qui oscille et d'une gaussienne. Ces solutions satisfont bien sur des relations d'orthonormalisation et de fermeture

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi_n^*(x) \varphi_m(x) = \delta_{nm}, \quad (\text{III.40.a})$$

$$\sum_{n \in \mathbb{N}} \varphi_n(x) \varphi_n(x') = \delta(x - x'), \quad (\text{III.40.b})$$

Notons enfin que les valeurs propres λ_n correspondantes ne sont pas dégénérées de sorte que $I(t)$ forme à lui seul un E.C.O.C.

III.4 Calcul de la phase total et la solution de l'équation de Schrödinger

Afin de déterminer la fonction d'onde correspondante à l'invariant $I(t)$ nous pouvons appliquer en principe les formules générales du chapitre 2.

Pour calculer la phase totale qui relie la fonction d'onde de l'invariant $I(t)$ avec la solution de l'équation de Schrödinger c'est-à-dire

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\lambda k} C_{\lambda k} \exp(i\alpha_{\lambda k}(t)) |\lambda, k, t\rangle \quad (\text{III.41})$$

Par conséquent la phase totale $\theta_n(t)$ est calculée par

$$\hbar \dot{\theta}_n(t) \varphi_n(x, t) = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(t) \right) \varphi_n(x, t), \quad (\text{III.42})$$

en reportant (III.41) dans (III.42), effectuant les dérivations et utilisant les propriétés des polynômes d'Hermite. Pour éviter cette petite complication, nous procédons ici d'une manière

différente qui nous permet d'éviter de faire appel aux propriétés des polynômes d'Hermite. En effet, en utilisant (III.15), on peut écrire (III.42) sous la forme équivalente

$$\hbar \dot{\theta}_n(t) \bar{\varphi}_n(x) = \left(i\hbar U^+(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} - U^+(t) H(t) U(t) \right) \bar{\varphi}_n(x), \quad (\text{III.43})$$

Par ailleurs, en se servant des relations (III.21), on peut montrer que

$$\begin{aligned} i\hbar U^+(t) \frac{\partial U(t)}{\partial t} &= \dot{B}(t) e^{-2A_3(t)} x^2 - \frac{\dot{A}_3(t)}{2} (xp + px) + \dot{A}_1(t) e^{A_3(t)} p \\ &\quad - (\dot{A}_2(t) - 2A_1(t) \dot{B}(t)) e^{-A_3(t)} x \\ &\quad + A_1^2(t) \dot{B}(t) - A_1(t) \dot{A}_2(t), \end{aligned} \quad (\text{III.44})$$

Et

$$\begin{aligned} U^+(t) H(t) U(t) &= \frac{e^{2A_3(t)}}{2m} p^2 + \frac{2B^2(t) e^{-2A_3(t)}}{2m} x^2 + \frac{(A_2(t) - 2B(t) A_1(t))}{m} e^{A_3(t)} p \\ &\quad - \left(\frac{2B(t) A_2(t) - 2B(t) A_1(t)}{m} - v(t) \right) e^{-A_3(t)} x \\ &\quad - \frac{B(t)}{m} (xp + px) + \frac{(A_2(t) - 2B(t) A_1(t))^2}{2m} + A_1(t) v(t), \end{aligned} \quad (\text{III.45})$$

En reportant (III.44) et (III.45) dans (III.43), on s'aperçoit aisément, d'après les résultats {(III.24), (III.25)}, {(III.27), (III.28)}, (III.32) et (III.10), que les coefficients de $(xp + px)$; p et x dans (III.43) s'annulent identiquement, c'est-à-dire

$$-\frac{\dot{A}_3(t)}{2} + \frac{B(t)}{m} \equiv 0, \quad (\text{III.46.a})$$

$$-\dot{A}_1(t) + \frac{A_2(t) - 2B(t) A_1(t)}{m} \equiv 0, \quad (\text{III.46.b})$$

$$\left(\frac{2B(t) A_2(t) - 2B(t) A_1(t)}{m} - v(t) \right) - v(t) - (\dot{A}_2(t) - 2A_1(t) \dot{B}(t)) \equiv 0, \quad (\text{III.46.c})$$

La relation (III.43) se réduit alors à

$$\hbar \dot{\theta}_n \bar{\varphi}_n(x) = \left(\begin{array}{c} -\frac{1}{2m\alpha(t)} (p^2 + \omega^2 x^2) + A_1^2(t) \dot{B}(t) - A_1(t) \dot{A}_2(t) \\ -\frac{(A_2(t) - 2B(t) A_1(t))^2}{2m} - v(t) A_1(t) \end{array} \right) \bar{\varphi}_n(x), \quad (\text{III.47})$$

En se servant maintenant de (III.35), (III.36), (III.46) et (III.10), on obtient donc

$$\dot{\theta}_n(t) = -\frac{\omega}{m\alpha(t)}\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2\hbar}\left(\frac{d}{dt}(A_1(t)A_2(t) + v(t)A_1(t))\right) - v(t)A_1(t), \quad (\text{III.48})$$

Qui s'écrit aussi sous la forme

$$\dot{\theta}_n(t) = -\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\omega}{m\alpha(t)} + \frac{\omega^2 \rho^2(t) - (\delta(t)\alpha(t) - \gamma(t)\rho(t))^2}{8m\hbar\alpha^2(t)\omega^2(t)}, \quad (\text{III.49})$$

Les phases $\theta_n(t)$ sont alors données par

Les solutions $\psi_n(x, t)$ sont obtenues à partir de (III.38) et (III.48), à une constante de phase près, sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\alpha(t)\hbar}} \exp\left(-i \int_0^t d\tau \left[\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\omega}{m\alpha(\tau)} + \frac{1}{2\hbar} A_1(\tau)v(\tau)\right]\right) \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} A_1(t)A_2(t)\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}(A_2(t)x - B(t)x^2)\right) \\ &\quad \times H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar\alpha(t)}}(x - A_1(t))\right), \end{aligned} \quad (\text{III.50})$$

Enfin, les solutions $\psi_n(x, t)$ sous la forme

$$\begin{aligned} \psi_n(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\alpha(t)\hbar}} \exp\left(-i \int_0^t d\tau \left[\left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{\omega}{m\alpha(\tau)} + \frac{1}{2\hbar} \frac{(\alpha(\tau)\delta(\tau) - \gamma(\tau)\delta(\tau))}{4\hbar\omega^2} v(\tau)\right]\right) \\ &\quad \times \exp\left(\frac{i}{8\hbar} \frac{(\alpha(\tau)\delta(\tau) - \gamma(\tau)\delta(\tau))\rho(\tau)}{\alpha(\tau)\omega^2}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left(-\frac{\rho(\tau)}{2\alpha(\tau)}x - B(\tau)x^2\right)\right) \\ &\quad \times H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar\alpha(t)}}\left(x - \frac{(\alpha(\tau)\delta(\tau) - \gamma(\tau)\delta(\tau))}{2\omega^2}\right)\right), \end{aligned} \quad (\text{III, 51})$$

Conclusion générale

Conclusion générale

Nous avons présenté la méthode exacte de résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps, introduite par Lewis --Riesenfeld dans son article. La particularité de cette méthode est qu'elle est simple et Elle s'applique principalement dans les problèmes à une ou deux dimensions. Cette étude a révélé une relation simple entre les états propres de l'invariant et la solution de l'équation de Schrödinger, nous lui avons adapté la technique des transformations unitaire dans le cadre d'un calcul simple et exacte de l'équation de Schrödinger.

Dans cette mémoire, nous avons déterminé la solution exacte de l'équation de Schrödinger d'une particule chargée, placée dans un champ électrique uniforme à une dimension et dépendant du temps après le calcul de la phase associé aux états de l'invariant.

Références Bibliographiques

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Schrödinger E, Die Naturwissenschaften, 14 (1926) 664.
- [2] C. C. Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, Mécanique quantique T1 (Hermann, Paris, 1977).
- [3] A. Messiah, Mécanique quantique T2, (Dunod, Paris, 1995) nouvelle édition
- [4] Lewis HR Jr and Riesenfeld WB 1969 J. Math.Phys. 10 1458.
- [5] H. Bekkar, F. Benamira and M. Maamache, Phys. Rev. A 68 (2003) 016101.
- [6] M.Wagner, Unitary transformations in solid-state physics, (Elsevier science Publisher, New_York, 1986).
- [7] J. Korean Phys. Soc. Vol.48, No, 4 (2006).
- [8] L. D. Landau et E. Lifchitz, Mécanique quantique (Mir, Moscou, 1967) traduit du russe par Edouard Gloukhian, 2ème édition.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons présenté l'équation de Schrödinger dépendante du temps comme un outil mathématique puissant pour décrire l'évolution dans le temps des systèmes quantiques. Nous avons montré que la transformation unitaire et la théorie des invariants représente des méthodes simples et globales permettant la résolution exacte de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Par l'application de la théorie des invariants, Nous avons étudié la dynamique d'une particule chargée dans un champ électrique uniforme à une dimension et dépendant du temps.

Abstract:

In this work, we have presented the time-dependent Schrödinger equation as a powerful mathematical tool for describing the evolution over time of quantum systems. We have shown that unitary transformation and invariant theory represent simple and global methods for the exact resolution of the time-dependent Schrödinger equation.

Through the application of the theory of invariants, we have studied the dynamics of a charged particle in a uniform electric field at one dimension and time dependent.

ملخص

في هذا العمل، قدمنا معادلة شرودنجر المعتمدة على الوقت كأداة رياضية قوية لوصف التطور مع مرور الوقت للأنظمة الكمومية. لقد أظهرنا أن التحول الأحادي والنظرية الثابتة يمثلان طرائق بسيطة وعالمية من أجل الدقة الدقيقة لمعادلة شرودنجر المعتمدة على الوقت.

من خلال تطبيق نظرية الثوابت، درسنا ديناميكية الجسيم المشحون في حقل كهربائي موحد في بعد واحد ويعتمد على الزمن.

Mots clets

La théorie des invariants, Schrodinger, transformaton unitaire