



N° d'ordre :

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et
de la Recherche Scientifique

Université de M'sila
Faculté des Sciences
Département de Physique

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de :

MASTER

Domaine : **Sciences de la matière**

Filière : **Physique**

Option : **Physique des Particules à haute Energie**

Par

NOUIBAT FATTOUM

THEME

**L'équation de Schrödinger dépendant du temps et la théorie
d'Invariant**

Soutenue le : 25/06/2013

Devant le jury composé de :

S. MEDJBER

MAA Univ. de M'sila

Président

H. BEKKAR

MCA Univ. de Sétif

Rapporteur

E.REDOUANE SALAH

MCB Univ. de M'sila

Examineur

Promotion Juin 2013

Remerciements

Nous tenons tout d'abord à remercier ALLAH le tout puissant et miséricordieux, qui nous a donné la force et la patience d'accomplir ce Modeste travail.

En second lieu, nous tenons à remercier notre encadreur Mr : BEKKAR HACENE, son précieux conseil et son aide durant toute la période du travail.

Nos vifs remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail Et de l'enrichir par leurs propositions.

Enfin, nous tenons également à remercier toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Sommaire

- <i>Introduction</i>	2
-----------------------------	---

Chapitre 1:L'équation de Schrödinger dépendant du temps

1. Introduction	5
2. La fonction d'onde	5
3. Résolution de l'équation de Schrödinger	6
3. a. Hamiltonien stationnaire.....	6
3. b. Hamiltonien dépendant du temps.....	9
b. 1. Transformation unitaire	9
b. 2. La méthode de propagateur	10
b. 3. La méthode de transformation espace-temps	11

Chapitre 2:La théorie des invariants

1. Introduction	17
2. Propriétés de l'opérateur invariant.....	17
3. La relation entre les vecteurs propres de H et I	18

Chapitre 3:Particule chargée dans un champ électrique

1. Potentiel linéaire	21
a- Forme d'onde plane	21
b- Forme de paquet d'onde (fonction d'Airy)	24
2. Une particule chargée dans un champ électrique	25
a- Forme d'onde plane	25
b- Forme de paquet d'onde (fonction d'Airy)	25

- <i>Conclusion</i>	28
---------------------------	----

Appendice: La fonction d'Airy	31
-------------------------------------	----

Références et bibliographiques	33
--------------------------------------	----

Introduction

L'étude des systèmes dépendant du temps a fait l'objet d'un grand intérêt dans la littérature, que ce soit en mécanique classique ou quantique, le retentissement d'intérêt sur ce sujet est dû au fait que les systèmes dépendant du temps peuvent être traités comme modèles exactement solubles et peuvent être utilisés dans plusieurs applications en physique.

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 [15], 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, ...), et la plus part des autres cas sont restés sans solutions, n'ont été résolus que par des méthodes numériques. Cependant pour les systèmes dépendants du temps (non stationnaires), on utilise les méthodes approximatives comme méthode 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. Les méthodes les plus utilisées sont : La méthode d'invariant [9], qui se base sur la définition d'un opérateur invariant \hat{I} , et qui vérifie

avec l'hamiltonien du système \hat{H} la relation de Liouville Von Neumann
$$\frac{d\hat{I}}{dt} = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{I}, \hat{H}],$$

ce qui signifie que les vecteurs propres de l'hamiltonien ne sont que ceux de l'opérateur d'invariant multiplié par un facteur de phase complexe.

La méthode de transformation unitaire qui est basée sur la définition d'un opérateur unitaire permettant de transformer le système physique compliqué en un autre plus simple facile à résoudre .

En plus de ces deux méthodes on peut citer aussi l'utilisation de la fonction propagateur[8] , et la méthode de transformation espace- temps [4 , 19]. Le choix de la meilleure méthode pour l'étude des systèmes dépend de la forme de l'Hamiltonien du système et de la fonction d'onde qu'on peut trouver (Gaussienne, état cohérent, ...).

Notre mémoire est subdivisé en trois chapitres : Le premier chapitre, comporte des rappels, plus particulièrement sur l'équation de Schrödinger dépendant du temps, le deuxième est consacré à la méthode d'invariant, on présente en détail les solutions de l'équation de Schrödinger pour potentiel linéaire, et plus particulièrement une particule chargée dans un champ électrique dans le troisième chapitre qui fait l'objectif de ce travail. Un appendice sur la fonction d'Airy est donné à la fin du mémoire.

CHAPITRE 1

L'équation de Schrödinger dépendant du temps

1-1 Introduction

La notion ondulatoire de la particule (L.De-Broglie 1924), permet au physicien Erwin Schrödinger [15], de développer une équation dite équation d'onde ou (équation de Schrödinger) pour décrire les propriétés ondulatoires de la particule

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}(t) \psi(x,t) \quad (1-1)$$

l'hamiltonien $\hat{H}(t)$ peut être exprimé comme la somme de deux opérateurs : un qui correspond à l'énergie cinétique, et l'autre à l'énergie potentielle, $\psi(x,t)$ est la fonction d'onde qui est une amplitude de probabilité, cette fonction d'onde contient toutes les informations sur l'état du système physique. 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. Cette équation linéaire et homogène en $\psi(x,t)$. par conséquent elle prend en compte le principe de superposition (les solutions peuvent être ajoutées en amplitude ou en phase pour pouvoir reproduire le phénomène d'interférence), et du premier degré par rapport au temps. Cette condition est nécessaire pour que l'état du système représenté par, $\psi(x,t_0)$ à l'instant t_0 détermine son état à tout instant ultérieur t .

1-2 La fonction d'onde

C'est un des postulats quantiques, elle est la solution de l'équation de Schrödinger. Cette fonction d'onde détermine tout ce qui peut être su au sujet du système physique, elle peut être une fonction complexe, depuis que c'est son produit avec son conjugué spécifie la probabilité très physique de trouver la particule dans un état particulier.

La fonction d'onde, $\psi(x,t)$ doit satisfaire les conditions suivantes :

- Elle doit être continue à x

- La dérivée $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ doit être continue. Ces contraintes sont appliquées sous condition de la

limite sur les solutions.

- Elle doit être normalisée. Cela implique que la fonction d'onde en approche à zéro comme x approche à l'infini c'est-à-dire :

$$\int \psi^* \psi dv = 1 \quad (1-2)$$

-Pour les systèmes hermitiens, la norme du vecteur d'état reste

constante $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0$ c'est-à-dire l'évolution au cours du temps ne modifie pas la probabilité globale de trouver la particule dans tout l'espace, qui reste égal à 1, donc on peut interpréter $|\psi(x,t)|^2$ comme une densité de probabilité de trouver la particule dans le point x à l'instant t .

- La superposition d'une infinité d'ondes de longueur d'onde différentes (plus approchées) ou de mêmes amplitudes centrées sur une valeur particulière λ donne le paquet d'onde.

Le paquet est la région de l'espace où ces ondes interfèrent de manière constructive.

Le centre d'un paquet d'onde c'est le point où le paquet d'onde prend sa grande valeur.

On peut définir le paquet d'onde sous la forme :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(\lambda) \psi_{\lambda}(x,t) d\lambda \quad (1-3)$$

avec $\psi_{\lambda}(x,t)$ la fonction d'onde caractérisée par la grandeur physique λ , et $g(\lambda)$ l'amplitude de superposition des fonctions $\psi_{\lambda}(x,t)$.

1-3 Résolution de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger joue un rôle très efficace dans la physique moderne. L'équation (1-1) est une équation générale qui donne l'évolution de la fonction d'onde quel que soit l'état du système. Dans la littérature ; la solution analytique est trouvée pour quelques systèmes physiques indépendants du temps, et par un nombre limité pour les systèmes quantiques dépendants du temps.

1-3-a Hamiltonien stationnaire

Si l'Hamiltonien du système ne dépend pas du temps, on écrit $\psi(x,t)$ sous la forme suivante :

$$\psi(x,t) = \phi(t) \varphi(x) \quad (1-4)$$

On substitue la fonction (1-4) dans l'équation (1-1), on obtient :

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = \frac{H_0 \varphi(x)}{\varphi(x)} = A \quad (1-5)$$

A constante, on déduit après sa signification physique à partir de l'équation (1-5) on

tire deux équations :

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = A \quad (1-6)$$

La solution de cette équation est donnée par :

$$\phi(t) = e^{\frac{i}{\hbar}At} \quad (1-7)$$

Et la deuxième équation :

$$H_0 \varphi(x) = A \varphi(x) \quad (1-8)$$

Pour déterminer la constante A , en calculant la valeur moyenne de H_0

$$\langle \varphi | H_0 | \varphi \rangle = A \langle \varphi | \varphi \rangle \quad (1-9)$$

Sachant que la fonction d'onde est normalisée donc $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$,on obtient :

$$A = \langle \varphi | H_0 | \varphi \rangle = E \quad (1-10)$$

Qui signifie que A représente l'énergie du système, pour cela on a l'habitude d'écrire directement la fonction d'onde pour les systèmes stationnaires sous la forme [13 ,17] :

$$\psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}Et} \varphi(x) \quad (1-11)$$

Avec la fonction $\varphi(x)$ la solution de l'équation de Schrödinger stationnaire a une dimension :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (1-12)$$

Dans le cas où la particule se déplace dans un champ central (potentiel central), c'est un potentiel de symétrie sphérique, il vaut mieux utiliser les coordonnées sphériques:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r, \theta, \varphi) \right\} \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi) \quad (1-13)$$

Où L^2 est l'opérateur carré du moment cinétique tel que:

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (1-14)$$

Où $0 < r < +\infty$, et θ, φ les angles polaires $0 \leq \theta \leq \pi$ et $0 \leq \varphi \leq 2\pi$

La séparation des variables, nous permet d'écrire la fonction d'onde comme:

$\psi(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{r} R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$, avec $R_{n,l}(r)$ la partie radiale, et $Y_l^m(\theta, \varphi)$ est partie angulaire de la fonction d'onde.

Par cette considération de fonction d'onde on obtient l'équation de Schrödinger radiale:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R(r) = 0 \quad (1-15)$$

Où l : le nombre quantique orbital.

1-3-b Hamiltonien dépendant du temps

Si l'Hamiltonien du système dépendant explicitement du temps, on ne peut pas séparer les paramètres espace-temps, pour cela plusieurs méthodes étaient proposées par les physiciens pour traiter des systèmes quantiques dépendant explicitement du temps, qui sont très intéressants en mécanique quantique. Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur celle de la fonction d'onde recherchée (Gaussienne, état cohérent,....).

Parmi les méthodes qui sont très utilisées ces dernières années nous pouvons citer:

b-1 transformation unitaire

Parmi les méthodes utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger la méthode de transformation unitaire, pour appliquer cette méthode il est nécessaire de définir un opérateur qui vérifie les propriétés générales suivantes :

-Par définition, un opérateur $\hat{U}(t)$ est unitaire si son inverse $\hat{U}^{-1}(t)$ est égal à son adjoint

$\hat{U}^+(t)$, c'est-à-dire :

$$\hat{U}(t) \hat{U}^+(t) = \hat{U}^+(t) \hat{U}(t) = 1 \quad (1-16)$$

- La transformation unitaire associée à l'opérateur $\hat{U}(t)$ conserve le produit scalaire des fonctions d'ondes dans l'espace correspondant.

-Le produit de deux opérateurs unitaires est aussi unitaire.

-Les opérateurs unitaires constituent la généralisation des opérateurs orthogonaux à des espaces complexes.

-Une condition nécessaire pour qu'un opérateur $\hat{U}(t)$ soit unitaire est que les transformés par $\hat{U}(t)$ des vecteurs d'une base orthonormée de l'espace, constituent une autre base orthonormée.

-Les valeurs propres d'un opérateur unitaire ne peuvent donc être que des nombres complexes de module égal 1.

-L'application de l'opérateur de transformation sur les vecteurs propres, et les opérateurs, faite sous la forme :

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(t)\rangle$$

(1-17)

$$\hat{A}(t) = \hat{U}(t) \hat{A}(t) \hat{U}^+(t)$$

de même qu'en mécanique classique on utilise les transformations canoniques pour simplifier les systèmes complexés, dans la mécanique quantique on utilise aussi les transformations unitaires, cette dernière, elle nous permettra de transformer un Hamiltonien très compliqué à un autre simple. Song et al [16], ont défini des opérateurs unitaires pour transformer les oscillateurs harmoniques généralisés, et singuliers à un système d'oscillateur harmonique simple (masse égale à 1, et fréquences ω_0 constant), qui est connue dans la littérature, et trouver les fonctions d'ondes de forme d'états cohérents. Et autres travaux donnés par Maamache[10], Fernandez[5] par la même technique.

b-2 la méthode de propagateur

Dans cette méthode on introduit la fonction de propagateur $K(x, \hat{x}, t, \hat{t})$ qui correspond au système étudié dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial K(x, x', t, t')}{\partial t} = \hat{H}(p, x, t) K(x, x', t, t') \quad (1-18)$$

pour tirer des conditions entre les paramètres de l'hamiltonien et de propagateur, et dans ce cas on écrit la nouvelle forme de $K(x, \hat{x}, t, \hat{t})$. En fonction des paramètres de

l'hamiltonien, et à partir de la relation :

$$K(x, t, x', t) = \sum_n \psi_n(x, t) \psi_n^*(x', t) \quad (1-19)$$

on peut tirer la forme de la fonction d'onde qui représente la solution de l'équation de Schrödinger. Hamprech [8] a étudié le potentiel linéaire par cette méthode.

b-3 La méthode de transformation espace-temps

Parmi les méthodes utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps la transformation espace-temps dans cette méthode on utilise des techniques mathématiques c-à-d changements des variables pour simplifier le système étudié. pour plus d'informations on représente comme exemple le travail de Feng [4]

On considère l'équation de Schrödinger suivante :

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2M(t)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + g_1(t) x \psi(x, t) \quad (1-20)$$

avec $\hbar = 1$, $M(t)$ et $g_1(t)$ sont des variables arbitraires dépendants du temps. Comme une première étape on substitue la fonction suivante :

$$\psi(x,t) = \varphi(x,t) \cdot \exp(i\beta(t)x) \quad (1-21)$$

Dans l'équation (1-20), avec $\beta(t)$ une variable arbitraire et déduire que $\varphi(x,t)$, vérifie l'équation

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x,t) = -\frac{1}{2M(t)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x,t) - i \frac{\beta(t)}{M(t)} \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x,t) + \left(\frac{\beta^2(t)}{2M(t)} + (\dot{\beta}(t) + g_1(t))x \right) \varphi(x,t) \quad (1-22)$$

pour simplifier l'équation (1-22), Feng [4] a utilisé la transformation espace-temps suivante :

$$y = x + v(t)$$

$$s = \int_0^t \frac{d\sigma}{M(\sigma)} \quad (1-23)$$

$$\varphi(x,t) = f(y,s)$$

Donc l'équation (1-22) devient:

$$\frac{i}{M(t)} \frac{\partial}{\partial s} f(y,s) = -\frac{1}{2M(t)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(y,s) + [g_1(t) + \dot{\beta}(t)] \cdot y \cdot f(y,s) + G(t) \cdot f(y,s) \quad (1-24)$$

$$\text{tel que } G(t) = \frac{\beta^2(t)}{2M(t)} - [g_1(t) + \dot{\beta}(t)] v(t) \text{ et } \dot{v}(t) = -\frac{\beta(t)}{M(t)}.$$

$$\text{Si on prend } g_1(t) + \dot{\beta}(t) = 0 \text{ et } f'(y,s) = f(y,s) \cdot \exp\left[-i \int_0^t G(t') dt'\right]$$

l'équation (1-24), se réduit à une équation de particule libre avec une masse $M=1$

$$i \frac{\partial}{\partial s} f'(y,s) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} f'(y,s) \quad (1-25)$$

et dont sa solution est connue en littérature, sous forme d'onde plane

$$f'(y,s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-i \left(Ay - \frac{A^2 S}{2} \right)\right] \quad (1-26)$$

A : nombre réel défini la direction de propagation de la particule suivant y.

Enfin, en utilisant les équations (1-25), (1-26), dans (1-21) on obtient la solution de l'équation (1-20) de la forme d'onde plane :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-iA(x+v(t))) \exp\left(-i\frac{A^2}{2} \int_0^t \frac{d\sigma}{m(\sigma)}\right) \exp\left(i\beta(t)x - i \int_0^t G(\sigma) d\sigma\right) \quad (1-27)$$

$$\text{Avec : } \beta(t) = -\int_0^t g_1(\sigma) d\sigma, \quad \text{et} \quad v(t) = -\int_0^t \frac{\beta(\sigma)}{M(\sigma)} d\sigma.$$

Feng [4], a présenté une autre solution à l'équation(1-20), à partir de l'équation (1-25), qui possède une autre solution de la forme de fonction d'Airy, donnée par :

$$f(y,s) = Ai\left[B\left(y - \frac{B^3 s^2}{4}\right)\right] \cdot \exp\left[i\frac{B^3 s}{2}\left(y - \frac{B^3 s^2}{6}\right)\right] \quad (1-28)$$

B : constant, et (Ai) représente la fonction d'Airy (voir appendice). La solution de l'équation (1-20) de la forme de paquet d'onde en fonction de la fonction d'Airy donnée par :

$$\begin{aligned} \psi(x,t) = & Ai\left[B\left(x + \int_0^t \frac{d\tau}{M(\tau)} \int_0^\tau g_1(\sigma) d\sigma - \frac{B^3}{4} \left(\int_0^t \frac{d\sigma}{M(\sigma)}\right)^2\right)\right] \\ & \exp\left[i\frac{B^3}{2} \int_0^t \frac{d\sigma}{M(\sigma)} \left(x + \int_0^t \frac{d\tau}{M(\tau)} \int_0^\tau g_1(\sigma) d\sigma - \frac{B^3}{6} \left(\int_0^t \frac{d\sigma}{M(\sigma)}\right)^2\right)\right] \\ & \exp\left[-\frac{i}{2} \int_0^t \frac{d\tau}{M(\tau)} \left(\int_0^\tau g_1(\sigma) d\sigma\right)^2\right] \exp\left[-ix \int_0^t g_1(\sigma) d\sigma\right] \end{aligned} \quad (1-29)$$

le paquet d'onde d'Airy propage suivant la trajectoire définie par :

$$x_0(t) = \frac{B^3}{4} \left[\int_0^t \frac{d\sigma}{M(\sigma)}\right]^2 - \int_0^t \frac{1}{M(\tau)} \int_0^\tau g_1(\sigma) d\sigma \quad (1-30)$$

- Cas de particule chargée dans un champ électrique

pour le cas d'une particule de masse m est constant, et de charge électrique q soumise à un champ électrique $V(x,t) = q \varepsilon_0 x + q \varepsilon x \cos(\omega t)$, avec $\varepsilon_0, \varepsilon, \omega$ sont des paramètres constants. On remplace dans les équations précédentes $g_1(t) = q(\varepsilon_1 + \varepsilon \cos \omega t)$ et

$M(t) = m$. Après les simplifications des calculs Feng [04] a obtenu la fonction de la forme d'onde plane suivante :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(iA \left(x + \frac{q}{m} \left[\frac{\varepsilon_0}{2} t^2 - \frac{\varepsilon}{\omega^2} \cos \omega t + \frac{\varepsilon}{\omega^2} \right] \right) - i \frac{A^2 t}{2m} \right) \exp\left(-i \frac{q}{\omega} \{ \varepsilon_0 \omega t + \varepsilon \sin \omega t \} x \right) \\ \exp\left(-i \frac{q^2}{2m\omega^3} \left[\frac{\varepsilon_0^2 (\omega t)^3}{3} + 2\varepsilon_0 \varepsilon (\sin \omega t - \omega t \cos \omega t) + \varepsilon^2 \left(\frac{1}{2} \omega t - \frac{1}{4} \sin 2\omega t \right) \right] \right)$$

Et de la forme de paquet d'onde en fonction de la fonction d'Airy donnée par

$$\psi(x,t) = Ai \left[B \left(x + \frac{q\varepsilon_0}{2m} t^2 - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \cos \omega t + \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} - \frac{B^3 t^2}{4m^2} \right) \right] \\ \exp \left[i \frac{B^3 t}{2m} \left(x + \frac{q\varepsilon_0}{2m} t^2 - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \cos \omega t + \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} - \frac{B^3 t^2}{6m^2} \right) \right] \exp \left[-ix \left(q\varepsilon_0 t + \frac{q\varepsilon}{\omega} \sin \omega t \right) \right] \quad (1-32) \\ \exp \left[-i \frac{q^2}{2m} \left\{ \frac{\varepsilon_0^2}{3} t^3 + \frac{\varepsilon^2}{2\omega^3} (\omega t - \frac{1}{2} \sin 2\omega t) + \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon}{\omega^3} (\sin \omega t - t\omega \cos \omega t) \right\} \right]$$

En plus des méthodes qu'on a citées il y a d'autres méthodes, et autres techniques utilisées pour résoudre l'équation de Schrödinger dépendant du temps à différents systèmes quantiques comme la méthode des Invariants qui sera abordée dans le deuxième chapitre.

CHAPITRE 2

La théorie des invariants

2-1 Introduction

L'étude des systèmes dépendant du temps a fait l'objet d'un grand intérêt dans la littérature, que ce soit en mécanique classique ou quantique. Le retentissement d'intérêt sur ce sujet est dû au fait que les systèmes dépendant du temps peuvent être traités comme modèles exactement solubles et peuvent être utilisés dans plusieurs applications en physique tel que l'optique, la mécanique quantique. La théorie des invariants a été introduite par Lewis et Riensfeld [9], et récemment cette théorie est généralisée pour étudier quelques propriétés des états stationnaires, ce que renforce cette dernière est que Lewis et Riensfeld, ont dérivé une simple relation entre les vecteurs propres de l'invariant \hat{I} et la solution de l'équation de Schrödinger. 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 relie au langage mathématique puissant qui l'a caractérisée, et sur sa souplesse dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Dans cette partie de notre travail, on donne quelques notions essentielles concernant la théorie des invariants.

A travers ces notions on peut approcher aux lecteurs au moins une idée sur le rôle de la théorie des invariants dans la solution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps qui sera appliquée ultérieurement.

2-2 propriétés de l'opérateur Invariant

Pour compléter la définition de la méthode des invariants il suffit donc de présenter quelques propriétés de l'opérateur Invariant \hat{I} .

On construit l'opérateur d'invariant \hat{I} à partir des opérateurs de position \hat{x} , de l'impulsion \hat{p} et des multipliés de \hat{x} , et \hat{p} .

-L'opérateur d'invariant \hat{I} vérifie avec l'hamiltonien du système \hat{H} la relation de Liouville-Von Neumann

$$\frac{d\hat{I}}{dt} = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{I}, \hat{H}] = 0 \quad (2-1)$$

-L'opérateur d'invariant est une constante de mouvement, donc ses valeurs propres sont indépendantes du temps.

2-3 la relation entre les vecteurs propres de H et I

Nous considérons un système dont l'Hamiltonien $H(t)$ est explicitement dépendant du temps, et nous supposons l'existence d'un autre opérateur Hermitien $I(t)$, L'équation de Schrödinger qui détermine le vecteur d'état dépendant du temps $|\psi\rangle$ est:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H(t) |\psi\rangle \quad (2-2)$$

Pour fixer les notations on considère l'état $|\varphi_n(t)\rangle$ comme un choix de vecteurs propres de référence de l'opérateur d'invariant, qui vérifie l'équation :

$$\hat{I}(t) |\varphi_n(k,t)\rangle = \lambda_n |\varphi_n(k,t)\rangle \quad (2-3)$$

λ_n représente les valeurs propres constantes de l'opérateur $\hat{I}(t)$, et k représente tous les autres nombres quantiques nécessaires pour spécifier les états propres.

$\hat{I}(t)$ exprimés en fonction de l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t)$ de l'équation de Schrödinger $i\frac{\partial}{\partial t}\hat{U} = \hat{U}\hat{H}$ par $\hat{I}(t) = \hat{U}(t)\hat{I}(0)\hat{U}^\dagger(t)$ il en résulte que l'évolué $|\varphi_n(t)\rangle = \hat{U}(t) |\varphi_n(0)\rangle$ d'un état initial $|\varphi_n(0)\rangle$ est toujours état propre de l'invariant $\hat{I}(t)$. La solution de l'équation de Schrödinger (2-2) est donnée par la forme :

$$|\psi\rangle = e^{-i\alpha_n t} |\varphi_n(k,t)\rangle \quad (2-4)$$

Où la phase $\alpha(t)$ est une fonction réelle du temps, pour déterminer en substituant $|\psi\rangle$ dans l'équation (2-2), et par la projection de $\langle\varphi_n(k,t)|$ sur l'état propre de l'opérateur on obtient :

$$\dot{\alpha}(t) = \frac{1}{\hbar} \langle\varphi_n(k,t)|\hat{H}(t)|\varphi_n(k,t)\rangle - i \langle\varphi_n(k,t)|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_n(k,t)\rangle \quad (2-5)$$

Comme nous l'avons signalé, plusieurs auteurs ont étudié les systèmes dépendants du temps par la théorie des invariants, parmi les quels : M. Maamache [11], J. R. Choi [3]. S.Menouar et al [12], X.C.Gao et al[92], ont généralisé la théorie de Lewis-Reisenfeld aux systèmes dépendant du temps non hermitiens, et A. Pedrosa [14], ont fait l'extension la théorie d'invariant au cas du spectre continu.

CHPITRE 3

Particule chargée dans un champ électrique

3-1 Potentiel Linéaire

l'équation de Schrödinger, pour une particule de masse $m(t)$ dépendant du temps soumise à un potentiel linéaire dépendant du temps donné par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \hat{H} \psi(x,t) \quad (3-1)$$

avec :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m(t)} + f(t)\hat{x} \quad (3-2)$$

$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ opérateur d'impulsion, \hat{x} l'opérateur de position, et $f(t)$ fonction arbitraire dépendant du temps. Dans notre travail, nous utilisons la méthode d'invariant de Lewis-Reisnfeld [9], pour résoudre l'équation de Schrödinger du potentiel linéaire dépendant du temps. Ce système était étudié par plusieurs auteurs Guedes [7], Bauer [2], et [1]. Bauer ont mentionné que la fonction d'onde qui a été trouvée par Guedes, est un cas particulier du travail de D. M. Volkov, qui a traité une particule chargée non relativiste soumise à un champ électromagnétique (un travail publié en 1935). Mais Feng [4], a proposé une autre méthode est donnée comme solution de forme de fonction d'Airy. Bekkar et al [1] ont donné la correcte application de la méthode invariante, et ont trouvé la solution exacte de forme d'onde plane, et ont déduit un paquet d'onde de forme de fonction d'Airy.

a- Forme d'onde plane

Nous proposons maintenant notre solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel Linéaire dépendant du temps (2-2), par la théorie d'invariant de Lewis-Reinsfeld [9]. En considérant de façon plus précise comment on peut choisir l'invariant $\hat{I}(t)$ qui vérifie avec l'hamiltonien toutes les conditions qu'on a déjà discutées dans le deuxième chapitre. Reprenons l'équation de Liouville-Neumann

$$\frac{d\hat{I}}{dt} = \frac{\partial \hat{I}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{I}, \hat{H}] = 0 \quad (3-3)$$

si on pose $\varphi_\lambda(x,t)$ comme un vecteur propre de l'opérateur invariant $\hat{I}(t)$ avec les valeurs propres λ_n on peut écrire la fonction d'onde qui représente la solution de l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$\psi_\lambda(x,t) = e^{i\lambda t} \varphi_\lambda(x,t) \quad (3-4)$$

Avec $\mu_\lambda(t)$ est une fonction arbitraire dépendante du temps, en substituant $\psi_\lambda(x,t)$ dans l'équation (3-1) on obtient alors :

$$\left(\frac{1}{i\hbar} H - \frac{\partial}{\partial t} \right) \varphi_\lambda(x,t) = \dot{\mu}(t) \cdot \varphi_\lambda(x,t) \quad (3-5)$$

On considère l'opérateur invariant linéaire :

$$\hat{I}(t) = A(t)\hat{p} + B(t)\hat{x} + C(t) \quad (3-6)$$

avec $A(t)$, $B(t)$, et $C(t)$ sont des fonctions réelles. A partir de l'équation (3-3) on obtient

$$\left(\dot{A} + \frac{1}{m} B \right) \hat{p} + \dot{B} \cdot \hat{x} + (\dot{C} - Af) = 0 \quad (3-7)$$

qui donne

$$A(t) = -B_0 \int \frac{1}{m(t)} dt + A_0$$

$$B(t) = B_0 \quad (3-8)$$

$$C(t) = A_0 \int f(t) dt - B_0 \int \left[f(t) \int \frac{1}{m(t)} dt \right] dt + C_0$$

Pour $m(t) = m$ l'équation (3-8) devient:

$$A(t) = -\frac{B_0}{m} t + A_0$$

$$B(t) = B_0 \quad (3-9)$$

$$C(t) = A_0 \int f(t) dt - \frac{B_0}{m} \int t f(t) dt + C_0$$

Avec A_0 , B_0 , C_0 sont des constantes.

La solution analytique de l'équation des vecteurs propres $\varphi_\lambda(x,t)$, et valeurs propres λ , de l'opérateur invariant $\hat{I}(t)$,

$$\hat{I}(t) \cdot \varphi_\lambda(x,t) = \lambda \cdot \varphi_\lambda(x,t) \quad (3-10)$$

est donné par :

$$\varphi_\lambda(x,t) = N \exp(\eta_\lambda(t)x + \rho(t)x^2) \quad (3-11)$$

N est la constante de normalisation tel que :

$$\rho(t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{B_0}{2A(t)} \quad (3-12)$$

et

$$\eta_\lambda(t) = \frac{i}{\hbar} \frac{\lambda - C(t)}{A(t)} \quad (3-13)$$

on remarque que $\rho(t)$, et $\eta(t)$ sont des fonctions imaginaires pures. reporté $\varphi_\lambda(x,t)$ dans l'équation (3-5) on obtient:

$$\dot{\mu}(t) = \frac{i\hbar}{2m} (\eta_\lambda^2(t) + 2\rho(t)) \quad (3-14)$$

On remarque que si $\rho(t) \neq 0$, la fonction $\mu_\lambda(t)$ n'est pas imaginaire pure. Pour obtenir une fonction normalisée, et acceptable physiquement (la norme bornée) [18], il est nécessaire de prendre $\rho(t) = 0$, qui implique directement $B(t) = 0$, est a partir de l'équation (3-9), on obtient $A(t) = A_0$, et la fonction $\mu(t)$ s'écrit sous la forme :

$$\mu(t) = \frac{-i}{2\hbar m} \int \left(\frac{\lambda - C(t)}{A_0} \right)^2 dt \quad (3-15)$$

Et finalement la solution exacte de l'équation de Schrödinger (3-1) de la forme d'onde plane donnée par :

$$\psi_\lambda(x,t) = N \exp\left[-\frac{i}{2\hbar m} \left(\int_0^t dt \left(\frac{\lambda - C(t)}{A_0} \right)^2 \right)\right] \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{\lambda - C(t)}{A_0} \right) x\right] \quad (3-16)$$

Avec N et la constante de normalisation.

b-Forme de paquet d'onde (fonction d'Airy)

L'onde plane présentée par la relation (3-16), a donné une densité de probabilité de position de la particule associée constante. Pour obtenir une fonction d'onde qui nous permettra une densité de probabilité dans un point x , on peut utiliser le principe de superposition des ondes planes, et on déduit le paquet d'onde associée, par l'utilisation de la relation :

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \cdot g(\lambda) \cdot \psi_\lambda(x,t) \quad (3-17)$$

Avec $g(\lambda)$ l'amplitude de superposition des ondes planes. on choisit l'amplitude $g(\lambda)$ de

cette forme $g(\lambda) = \exp\left(\frac{i\lambda^3}{3}\right)$ et on utilise l'intégrale qui représente la fonction de Airy

suivante :

$$Ai[Z] = \int_{-\infty}^{+\infty} d\lambda \exp(i\lambda Z) \exp\left(i\frac{\lambda^3}{3}\right) \quad (3-18)$$

avec le changement $\lambda \rightarrow \frac{\lambda}{B} + \left(\frac{B^2 S}{2}\right)$ dans la fonction (2-37), tel que $S = \frac{t}{m}$ et B est constante.

après l'intégration on obtient le paquet d'onde de la forme de fonction d'Airy :

$$\begin{aligned} \psi(x,t) = A_0^{1/3} \exp\left[-\frac{i}{A_0} C(t)x - \frac{i}{2m} \left(\int_0^t d\tau C(\tau)\right)^2\right] \exp\left[\frac{iB^3 S}{2A_0} \left(x + \frac{1}{m} \int_0^t d\tau C(\tau) - \frac{B^3 S}{6}\right)\right] \\ \times Ai\left[\frac{iB^3 S}{2A_0^{2/3}} \left(x + \frac{1}{m} \int_0^t d\tau \cdot C(\tau) - \frac{B^3 S^2}{4}\right)\right] \end{aligned} \quad (3-19)$$

On remarque que la solution (1-29) donnée par Feng [4], n'est pas une nouvelle solution de l'équation de Schrödinger, mais juste le paquet d'onde trouvé par l'intégration d'onde plane $\psi_\lambda(x,t)$, avec une amplitude.

Conclusion

Nous pouvons dire que l'objectif qui a été visé au départ, consistant en la résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps par la méthode d'Invariant (Lewis-Reisfeld) a été plus ou moins atteint par l'aboutissement de ce modeste travail qui, nous espérons, reflètera la richesse des notions et des connaissances acquises lors de son élaboration.

Nous avons obtenu la solution exacte de l'équation de Schrödinger pour une particule chargée soumise à un champ électrique dépend du temps par la méthode des Invariants, et on a déduit la solution de forme de paquet d'onde en fonction de fonction d'Airy. Notre résultat était en accord avec le résultat obtenu par Feng qui a utilisé la méthode de transformation espace-temps.

Fonction d'onde:

Méthode de transformation espace-temps

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(iA \left(x + \frac{q}{m} \left[\frac{\varepsilon_0}{2} t^2 - \frac{\varepsilon}{\omega^2} \cos \omega t + \frac{\varepsilon}{\omega^2} \right] - i \frac{A^2 t}{2m} \right) \exp\left(-i \frac{q}{\omega} \{ \varepsilon_0 \omega t + \varepsilon \sin \omega t \} x \right) \right. \\ \left. \exp\left(-i \frac{q^2}{2m\omega^3} \left[\frac{\varepsilon_0^2 (\omega t)^3}{3} + 2\varepsilon_0 \varepsilon (\sin \omega t - \omega t \cos \omega t) + \varepsilon^2 \left(\frac{1}{2} \omega t - \frac{1}{4} \sin 2\omega t \right) \right] \right) \right)$$

Méthode d'invariant

$$\psi_\lambda(x,t) = \exp\left\{ i \frac{\lambda}{\hbar A_0} \left[x + \frac{q}{m} \left(\frac{\varepsilon_0}{2} t^2 - \frac{\varepsilon}{\omega^2} \cos \omega t + D \right) \right] - i \frac{\lambda^2}{2m\hbar A_0^2} t \right\} \exp\left\{ -i \frac{q}{\omega \hbar} \left[\varepsilon_0 \omega t \right. \right. \\ \left. \left. + \varepsilon \sin \omega t + \frac{\dot{C}}{A_0} \right] x \right\} \exp\left\{ - \frac{i\dot{C}}{2m\hbar A_0^2} \left[A_0 \right. \right. \\ \left. \left. q\varepsilon_0 t^2 - \frac{2q\varepsilon A_0}{\omega^2} \cos \omega t + \dot{C} t - 2\lambda t \right] \right\}$$

Paquet d'onde (fonction d'Airy):

Méthode transformation espace-temps

$$\psi(x,t) = Ai \left[B \left(x + \frac{q\varepsilon_0}{2m} t^2 - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \cos \omega t + \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} - \frac{B^3 t^2}{4m^2} \right) \right] \\ \exp \left[i \frac{B^3 t}{2m} \left(x + \frac{q\varepsilon_0}{2m} t^2 - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \cos \omega t + \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} - \frac{B^3 t^2}{6m^2} \right) \right] \exp \left[-ix \left(q\varepsilon_0 t + \frac{q\varepsilon}{\omega} \sin \omega t \right) \right] \\ \exp \left[-i \frac{q^2}{2m} \left\{ \frac{\varepsilon_0^2}{3} t^3 + \frac{\varepsilon^2}{2\omega^3} (\omega t - \frac{1}{2} \sin 2\omega t) + \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon}{\omega^3} (\sin \omega t - t\omega \cos \omega t) \right\} \right]$$

Méthode d'invariant

$$\psi(x,t) = Ai \left\{ \frac{1}{\hbar A_0} \left[x + \frac{q\varepsilon_0}{2m} t^2 - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \cos \omega t + F - \frac{t^2}{4m^2 A_0^3 \hbar} + \dot{C} t \right] \right\} \exp \\ \left\{ -i \frac{x}{\hbar} \left(q\varepsilon_0 t + \frac{q\varepsilon}{\omega} \sin \omega t + \frac{\dot{C}}{A_0} \right) \right\} \exp \left\{ - \frac{i q^2}{2m\hbar A_0^3 \hbar^2} \left[x + \frac{q\varepsilon_0}{2m} t^2 - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \cos \omega t - \frac{t^2}{6m^2 A_0^3 \hbar} \right] \right\} \exp \left\{ - \frac{i q^2}{2m\hbar} \left[\frac{\varepsilon_0^2 t^3}{3} + \frac{\varepsilon^2}{2\omega^3} (\omega t - \frac{1}{2} \sin 2\omega t) + \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon}{\omega^3} (\sin \omega t - t\omega \cos \omega t) \right] \right\} + \dot{C} \left[A_0 q\varepsilon_0 t^2 - \frac{2A_0 q\varepsilon}{\omega^2} \cos \omega t - \frac{i t^2}{2\hbar^2 m^2 A_0^4} + \dot{C} \right]$$

Appendice

La fonction d'Airy

La fonction d'Airy est une fonction qui est utilisée pour expliquer les phénomènes physiques spécialement en optique, mécanique quantique, électromagnétique, et transfert radioactif. Les fonctions d'Airy $Ai(x)$, et $Bi(x)$ définies comme deux indépendantes solutions de l'équation différentielle

$$\frac{d^2y}{dx^2} - K^2xy = 0 \quad (\text{A-1})$$

la solution générale $y(x)$ est de la forme

$$y(x) = A Ai(K^{2/3}x) + B Bi(K^{2/3}x) \quad (\text{A-2})$$

avec A , et B les constantes d'intégration, et Ai , Bi les fonctions d'Airy

$$\begin{aligned} Ai(Z) &= \frac{1}{3}\sqrt{Z} \left[I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}Z^{\frac{3}{2}}\right) - I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}Z^{\frac{3}{2}}\right) \right] \\ &= \sqrt{\frac{Z}{3\pi}} K_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}Z^{\frac{3}{2}}\right) \end{aligned} \quad (\text{A-3})$$

et

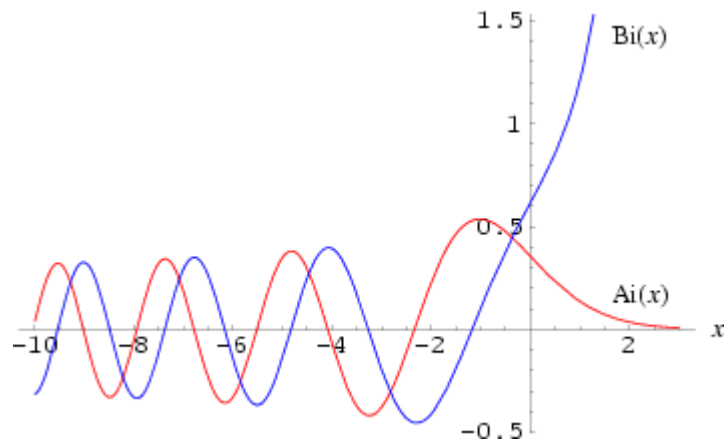
$$Bi(Z) = \frac{1}{3}\sqrt{Z} \left[I_{-\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}Z^{\frac{3}{2}}\right) + I_{\frac{1}{3}}\left(\frac{2}{3}Z^{\frac{3}{2}}\right) \right] \quad (\text{A-4})$$

tel que $I(Z)$ sont les fonctions de Bessel modifiée au 1^{er} espèce, et $K(z)$ la fonction de Bessel modifiée au 2^{ème} espèce. Il y a une autre définition de la fonction d'Airy $Ai(x)$ de forme d'intégration sous la forme suivante :

$$Ai(z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(zt+t^3)} dt \quad (\text{A-5})$$

pour $x=0$, $Ai(0) = \frac{1}{3^{2/3}\Gamma(2/3)}$, avec $\Gamma(s)$ fonction Gamma.

$Ai(x)$ été positif pour des valeurs positives a x , et tend vers zéro pour $x \rightarrow +\infty$.



variation des fonctions $Ai(x)$, et $Bi(x)$ dans l'intervalle $[-10, 10]$. (Mathematica)

Bibliographie

- [1] Bekkar. H, F.Benamira, and M. Maamache, Phys. Rev. A. 68 (2003) 016101
- [2] J. Bauer , Phys . Rev . A 65 (2002) 036101
- [3] J.R.Choi,Pramana-J.Phys.61,7(2003)
- [4] M.Feng, Phys. Rev. A. 64 (2003) 034101
- [5] Fernandez. M, and H.Moya-Cessa, Phys. Rev. A 67 (2003) 063803
- [6] Gao. X. C, J. B. Xu, and T. Z. Qian, Phys. Rev. A 46 (1992) 3626
- [7] I. Gedes, Phys. Rev. A 63 (2001) 034102
- [8] B. Hamprecht, arXiv : Quant-Ph 0211040 (2002)
- [9] Lewis. H. R, and R. Riesenfeld, Journal of Mathematicol physics V10 (1969) 1458
- [10] Maamache. M, Phys. Rev. A 61 (2000) 026102
- [11] Maamache. M, Phys. Rev. A 2 (1995) 936
- [12] S.Menouar, M.Maamache, H.Bekkar, and J.R.Choi, Journal of the Korean Physical Society, Vol.58, N°1, January 2011
- [13] A.Messiah, Mécanique quantique T1 ,2 (Dunod Paris 1995) nouvelle édition
- [14] Pedrosa. A, and I. Guedes arXiv: Quant-ph 0307084 (2003)
- [15] Schrödinger. E , Naturwissenschaften 14 (1926) 664
- [16] D.Y. Song, arXiv : Quant-Ph 0002065(2000)
- [17] C.C.Tannoundji,B.Diu,F.Lalöe,Mécanique quntique T1,2(Hermann,Paris,1977)
- [18] Truax. D. R, J. Math. Phys 23 (1982) 43
- [19] A.V. Zukhov, Phys.Lett . A. 256 (1997) 325

المخلص:

إن معادلة شرودنجر تلعب دورا أساسيا في الميكانيك الكمي لأنها تتحكم في التطور الزمني للنظام الفيزيائي، لحل هذه المعادلة المتعلقة بالزمن، توجد عدة طرق تحليلية أو رقمية، من بينها طريقة المؤثر الصامد وهي طريقة تحليلية بسيطة مرنة، مكنتنا من الحصول على حل دقيق لمسألة جسيمة مشحونة خاضعة لحقل كهربائي على شكل موجة مستوية وعلى شكل حزمة الموجة بدلالة الدالة الخاصة لايري.

الكلمات المفتاحية: معادلة شرودنجر المتعلقة بالزمن، طريقة المؤثر الصامد.

Abstract :

The Schrödinger equation plays a fundamental role in quantum mechanics because it is what governs the evolution in time of the physical system. The Invariant method is simple and flexible wave function is used, it allowed us to obtain an exact solution of the system of charged particles in an electric field of the wave plane and form package Airy function.

Keywords: Schrödinger equation of the time-dependent, the invariant method

Résumé:

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. On utilise la méthode d'Invariant qui est simple et souple, elle nous a permis d'obtenir une solution exacte du système de particule chargée dans un champ électrique de la forme d'onde plane, et de la forme paquet d'onde on fonction de fonction d'Airy.

Mots clés : l'équation de Schrödinger dépendant du temps, la méthode d'Invariant.