la démonstration du principe fondamentale de la dynamique à partir de l'équation de Schrödinger

PAR SABIR ILYASS

HYPOTHÈSE: On néglige tout les effets relativistes, et on suppose que le temps est absolue.

L'état à l'instant t d'un système en mécanique quantique est décrit par $\Psi(t)$

Théorème 01 (d'Ehrenfest)

Soit A une grandeur physique représentée par l'opérateur autoadjoint $\hat{A}$, et $\langle\hat{A}\rangle$ sa valeur moyenne

on a :

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{dt}} = \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{2\pi}{i.h}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$

Démonstration. □

On a la valeur moyenne de l'opérateur $\hat{A}$ est définie par :

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

On dérive cette égalité par rapport au temps ,il vient:

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

Or d'après l'équation de Schrödinger on a :

$$\frac{i.h}{2\pi}\frac{d|\psi(t)\rangle}{\mathrm{dt}} = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$$

Par conjugaison complexe on obtient aussi :

$$-\frac{i.h}{2\pi}\frac{d|\psi(t)\rangle}{\mathrm{dt}} = \langle\psi(t)|\hat{H}$$

Donc

$$\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{\mathrm{dt}} = \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}|\psi(t)\rangle = \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{2\pi}{i.h}\langle[\hat{A},\hat{H}]\rangle$$

D'où le résultat

Théorème 02 (les relations d'Ehrenfest)

Pour les systèmes quantiques possédant un analogue classique, le théorème d'Ehrenfest appliqué aux opérateurs position et impulsion donne:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{m}\langle\hat{P}\rangle$$

Et

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{\mathrm{dt}} = \frac{1}{m}\langle F\rangle$$

Démonstration. □

Soit une particule dans un champ potentiel, sa fonction Hamiltonienne est de la forme:

$$\hat{H}(x,p,t) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x,t)$$

Or d'après le théorème d'Ehrenfest appliqué à P, on a :

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle}{\mathrm{dt}}=\left\langle\frac{\partial\hat{P}}{\partial t}\right\rangle+\frac{2\pi}{i.h}\langle[\hat{P},\hat{H}]\rangle\,(1)$$

$$\hat{P}=-i\frac{h}{2\pi}\nabla$$

$\hat{P}$ n'est pas une fonction explicite du temps et la relation (1) se réduit à:

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle}{\mathrm{dt}}=\frac{2\pi}{i.h}\langle[\hat{P},\hat{V}(x,t)]\rangle=\langle-\nabla\hat{V}(x,t)\rangle=\langle F\rangle$$

De même, on applique le théorème d'Ehrenfest à x, on obtient :

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{\mathrm{dt}}=\frac{2\pi}{i.h}\left\langle\left[\hat{x},\frac{\hat{P}^2}{2m}\right]\right\rangle=\frac{\pi}{i.m.h}\langle[\hat{x},\hat{P}^2]\rangle$$

Avec :

$$[\hat{x},\hat{P}^2]=\hat{P}[\hat{x},\hat{P}]-[\hat{x},\hat{P}]\hat{P}=2i\frac{h}{2\pi}\hat{P}$$

D'où

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{\mathrm{dt}}=\frac{1}{m}\langle F\rangle$$

la démonstration du principe fondamentale de la dynamique à partir de l'équation de Schrödinger

On a d'après ces deux relations d'Ehrenfest:

$$m\frac{d^2}{\mathrm{dt}^2}\langle r\rangle=\langle-\nabla V\rangle$$

Or :

$$\langle\nabla V\rangle=\langle\psi|\nabla V|\psi\rangle=\int\psi^\star\nabla V\psi d^3r=\int\nabla V|\psi|^2d^3r$$

on suppose que le paquet d'onde est suffisamment localisé, (ce qui est le cas à l'échelle macroscopique.)

Alors:

$$\int \nabla V|\psi|^2 d^3r = \int [\nabla V]_{r=\langle r\rangle}|\psi|^2 d^3r = [\nabla V]_{r=\langle r\rangle}\int |\psi|^2 d^3r = [\nabla V]_{r=\langle r\rangle}$$

Car $\int |\psi|^2 d^3r = 1$, d'où:

$$\boxed{m\frac{d^2}{\mathrm{dt}^2}\langle r\rangle = \langle -\nabla V\rangle_{r=\langle r\rangle} = \langle F\rangle_{r=\langle r\rangle}}$$

Avec $\langle F\rangle_{r=\langle r\rangle}$, représente la force prise au centre du paquet d'onde de la particule étudiée

D'où le deuxième loi de Newton.