

Espace de Hilbert de dimension infinie - particule libre massive

N. Fabre*

May 14, 2024

Dans ce cours, nous traitons de la description des systèmes quantiques à variables continues. Le cas de l'électron libre non-relativiste est donnée, la relation de sa dynamique, et la longueur de De Broglie est retrouvée.

1 Généralité sur la description d'un système quantique à variable continue

1.1 Une approche simple de la dimension infinie

Les systèmes quantiques deviennent plus complexes lorsqu'ils sont décrits par des fonctions d'ondes appartenant à des espaces vectoriels de dimensions plus élevées. Par exemple, un "qutrit" représente un système quantique avec trois états distincts notés $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle$.

Un "qudit" représente un système quantique avec d états distincts, dont la fonction d'onde peut s'écrire:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^d \psi_i |i\rangle \quad (1)$$

où les $\psi_i = \langle i|\psi\rangle$ sont les amplitudes de probabilité associées à l'état i . La valeur absolue au carré $|\psi_i|^2$ est interprétée comme une probabilité de trouver le système quantique dans l'état i , et on a $\sum_{i=1}^d |\psi_i|^2 = 1$. Le développement de la fonction d'onde est effectué dans une base orthonormée, où l'orthogonalité est donnée par : $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Des systèmes quantiques de dimension finie sont, par exemple, les niveaux d'énergie d'un atome, le temps d'arrivée d'un photon, etc., comme cela a été décrit dans le premier cours.

*nicolas.fabre@telecom-paris.fr

A faire

En mécanique quantique, des systèmes comme un electron libre non-relativiste, un oscillateur harmonique quantique, les variables position et impulsion d'un photon, sont des systèmes quantiques qui sont décrit par des vecteurs dans des espaces de Hilbert de dimension infinie. C'est dans un sens comme si "d" va vers l'infini, où les systèmes peuvent occuper un continuum d'états:

$$\sum_{i=1}^d \psi_i |i\rangle \rightarrow |\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) dx |x\rangle. \quad (2)$$

Pour le moment, x désigne n'importe quel type de variables continues physiques. La fonction à valeur complexe $\psi(x)$ est une amplitude de probabilité pouvant prendre des valeurs complexes, qui appartient à l'espace de Hilbert, un espace de fonctions dont le carré est intégrable: $L^2(\mathbb{R}) = \{\psi(x) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx < \infty\}$.

Il faut bien faire attention que $|x\rangle$ est un vecteur appartenant à un espace de Hilbert de dimension infinie, qui ne correspond pas à l'espace labelisé par la coordonnée x . C'est fondamentalement différent de la mécanique du point en ce sens. Le bra est défini comme le complexe conjugué du ket associé :

$$\langle\psi| = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) dx \langle x| \quad (3)$$

appartenant à l'espace de Hilbert dual. Le produit scalaire entre deux fonctions d'ondes est défini comme le produit hermitien entre le bra et le ket :

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx' \int_{\mathbb{R}} dx, \phi(x') \psi(x) \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} = \int_{\mathbb{R}} \phi^*(x) \psi(x) dx \in \mathbb{C}. \quad (4)$$

Lorsque $\phi = \psi$, on obtient la condition de normalisation de la fonction d'onde :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (5)$$

La valeur absolue au carré de l'amplitude de probabilité $|\psi(x)|^2$ est une densité de probabilité de trouver le système quantique dans l'état x , alors que $|\psi(x)|^2 dx$ est la probabilité correspondante, cette dernière étant bien normalisée à 1. À noter que la fonction d'onde $|\psi\rangle$ n'a pas de dimension, dx est homogène à une dimension d'espace, donc $\psi(x)$ est homogène à l'inverse d'une dimension d'espace.

Operation projective

En ce qui concerne les opérations projectives, la fonction d'onde après l'action du projecteur \hat{P} a la même forme que celle en dimension finie, soit :

$$|\psi\rangle_{\text{out}} = \frac{\hat{P} |\psi\rangle_{\text{in}}}{|\hat{P} |\psi\rangle_{\text{in}}|} \quad , \quad \hat{P} = \int dx P(x) |x\rangle \langle x|. \quad (6)$$

Il ne faut pas oublier de renormaliser la fonction d'onde après une telle opération projective. À noter que pour une opération unitaire, il n'y a pas besoin de renormaliser la fonction d'onde, car l'opération unitaire conserve la norme du vecteur. Un tableau récapitulatif entre la dimension finie et infinie est présenté sur la Fig. 1. On y montre les différentes décompositions, les conditions d'orthonormalité, etc.

La base de décomposition de la fonction d'onde $|x\rangle$ est en réalité un choix dû à la base de mesure, lié au vecteur propre d'une observable dite de position, que nous allons étudier à présent.

1.2 Opérateurs position et impulsion

Nous allons chercher à interpréter mathématiquement et physiquement la fonction d'onde $|x\rangle$. On s'intéresse à présent aux observables position et impulsion, qui ont des spectres continus.

Operateur position

L'observable position peut se mettre sous la forme de l'équation aux valeurs propres:

$$\hat{X} |x\rangle = x |x\rangle. \quad (7)$$

	Dimension finie	Dimension infinie
Décomposition	$ \psi\rangle = \sum_{i=1}^d \psi_i i\rangle$	$ \psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) dx x\rangle$
Fermeture	$\sum_{i=1}^d i\rangle \langle i = \hat{1}$	$\int_{\mathbb{R}} x\rangle \langle x dx = \hat{1}$
Orthonormalité	$\langle i j\rangle = \delta_{ij}$	$\langle x' x''\rangle = \delta(x' - x'')$
Normalisation	$\sum_{i=1}^d \psi_i ^2 = 1$	$\int_{\mathbb{R}} \psi(x) ^2 dx = 1$
Probabilité de mesure	$P_i = \langle i \psi\rangle ^2 = \psi_i ^2$	$P(x) = \psi(x) ^2$
Espérance du résultat de mesure	$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{i,j} \psi_i \psi_j^* \langle j \hat{A} i\rangle$	$\langle \hat{A} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \psi(x) \psi^*(x') \langle x' \hat{A} x\rangle dx dx'$

Table 1: Correspondance pour la dimension finie (paramètre discret) et infinie indénombrable (paramètre continu). On peut encore étendre à plusieurs paramètres continus via des intégrales multiples (3 positions de l'espace), le principe reste le même.

C'est un opérateur hermitien $\hat{X} = \hat{X}^\dagger = \int_{\mathbb{R}} x |x\rangle \langle x| dx$ dont ses valeurs propres sont réelles, donc c'est une observable. Par exemple, avec un écran on peut mesurer directement la distribution de position x d'un électron. La recherche des vecteurs propres de \hat{X} revient à trouver les états d'une particule complètement déterminés. Ces vecteurs propres forment une base orthogonale $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ (voir exercice), et on admet la relation de fermeture:

$$\int_{\mathbb{R}} dx |x\rangle \langle x| = \mathbb{I}. \quad (8)$$

On peut donc décomposer la fonction d'onde en appliquant le ket $|\psi\rangle$ à droite de la relation de fermeture:

$$\int_{\mathbb{R}} dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (9)$$

La fonction d'onde est donc décomposée dans une base de vecteurs propres d'une observable. Les coefficients de la décomposition sont $\langle x|\psi\rangle$, qui sont interprétés comme des amplitudes de probabilité. Au cours d'une expérience interférométrique, on mesure en pratique les distributions de probabilités $|\psi(x)|^2$. On parle de la **représentation** x lorsque la fonction d'onde est décomposée dans la base de la position x .

On a le choix de la base pour décomposer un vecteur tant que cela correspond à une base orthonormée. Le choix ici est celui de la base de mesure car elle correspond aux valeurs propres de l'observable position (les pixels de l'écran pour les trous de Young). Pour la polarisation, l'observable était aussi liée au dispositif de détection, le choix des orientations des cubes séparateurs de polarisation suivi des détecteurs de photons uniques. Pour le spin, l'observable était liée à l'orientation du champ magnétique du Stern et Gerlach quantifiant les deux valeurs propres de l'observable $\hat{\sigma}_z$, puis de l'écran.

Exemple

Exemple : À l'observable position \hat{X} , on lui associe des vecteurs propres $|x\rangle$ et des valeurs propres x . Ces vecteurs propres forment une base orthonormée, on peut donc décomposer une fonction d'onde dans cette base : $|\psi\rangle = \int \psi(x) dx |x\rangle$. Lorsque l'on mesure la position x_0 d'une particule associée au vecteur propre $|x_0\rangle$, avec un détecteur placé en x_0 , on obtient la densité de probabilité de mesurer la fonction d'onde $|\psi\rangle$ en x_0 :

$$P(x_0) = |\langle x_0|\psi\rangle|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}} \langle x_0|x\rangle \psi(x) dx \right|^2 = \left| \int_{\mathbb{R}} \delta(x - x_0) \psi(x) dx \right|^2 = |\psi(x_0)|^2 \quad (10)$$

Une fois obtenue la distribution de probabilité en position $|\psi(x)|^2$, celle obtenue à l'aide d'un détecteur après les fentes de Young, on peut en déduire les valeurs moyennes et l'écart-type avec un calcul après la mesure. En effet, on a :

$$\langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x |\psi(x)|^2 dx \quad (11)$$

Et de la même manière, on peut calculer les moments d'ordre supérieurs:

$$\langle \psi | \hat{X}^2 | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi(x)|^2 dx \quad (12)$$

Reprenons à présent l'expérience des trous de Young. Un électron unique est décrit par une fonction d'onde suivante :

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x) |x\rangle, \quad (13)$$

où $\psi(x)$ désigne l'amplitude de probabilité d'avoir un électron en x , intrinsèque à la source d'électron elle-même. La largeur de cette fonction doit être suffisante pour qu'il y ait une probabilité non-nulle de traverser les deux fentes. Si c'est le cas, une observation en champ lointain permet de faire recouvrir les deux cônes de diffraction des deux fentes. Dans cette zone d'interférence, on ne sait pas si l'électron a traversé la fente du haut ou du bas. En plaçant un écran à l'infini, on est dans des conditions de Fraunhofer (voir exercice), et on peut mesurer la distribution de probabilité spatiale de l'électron. Il faut bien comprendre que l'obtention de cette distribution de probabilité ne s'obtient qu'après de nombreuses répétitions de l'expérience comme montré sur la Fig. 1. Une fois obtenue cette distribution de probabilité $P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2$, on peut en déduire les moments d'ordre supérieur.

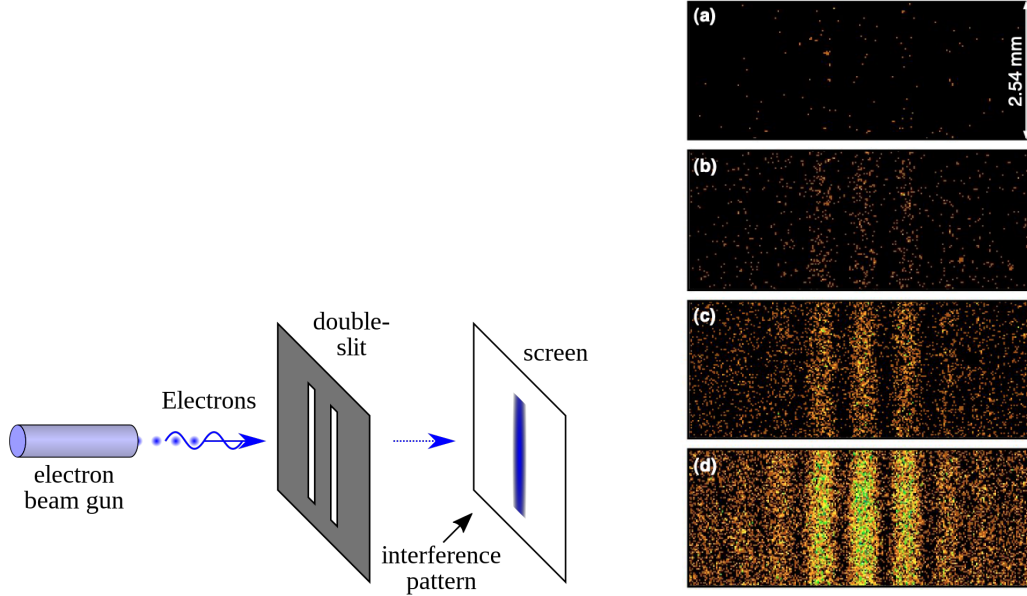


Figure 1: (Gauche) Expérience des trous de Young. (Droite) Proviens de la thèse de Vincent Jacques. Observation de la construction des franges d'interférence photon par photon au moyen de la caméra CCD intensifiée. Les images (a), (b), (c) et (d) correspondent respectivement à l'accumulation de 10, 100, 500 et 2000 clichés, chacun des clichés étant associé à un temps d'ouverture de 1 s de la caméra. Le nombre de photons détecté par cliché est en moyenne égal à 10.

Opérateur impulsion

De la même façon, les vecteurs propres de l'opérateur hermitien \hat{p} revient à chercher les états d'une particule complètement déterminé, c'est à dire pour lequel l'impulsion est connue parfaitement. La relation aux valeurs propres peut se mettre sous la forme:

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \quad (14)$$

et une représentation possible de l'opérateur est: $\hat{p} = \int_{\mathbb{R}} p|p\rangle\langle p|dp$ qui peut se voir comme une "matrice diagonale de dimension infinie". Dans l'expérience des trous de Young, placer un écran à l'infini correspond à mesurer la distribution de l'impulsion. Cette considération est similaire en optique ondulatoire. On mesure toujours la distribution de la position, mais celle-ci est l'image de la distribution de l'impulsion. C'est une base orthogonale dans le sens où: $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$, et on admet la relation de fermeture:

$$\mathbb{I} = \int_{\mathbb{R}} |p\rangle\langle p|dp. \quad (15)$$

On peut alors également décomposer la fonction d'onde dans la représentation p :

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\psi}(p)|p\rangle dp \quad (16)$$

où $\langle p|\psi\rangle = \tilde{\psi}(p)$ est l'amplitude de probabilité de trouver une particule avec l'impulsion p . $\tilde{\psi}(p)dp$ représente la probabilité de trouver la particule avec une impulsion p , et on a également par normalisation de la fonction d'onde: $\int_{\mathbb{R}} dp |\tilde{\psi}(p)|^2 = 1$. La valeur moyenne de l'impulsion peut s'écrire:

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} p |\tilde{\psi}(p)|^2 dp. \quad (17)$$

Relation entre la fonction d'onde en x et p

Jusque là, on a décomposé la fonction dans deux bases continues possibles, correspondant aux vecteurs propres de deux observables. A t'on une relation explicite entre $\psi(x)$ et $\tilde{\psi}(p)$ et de manière équivalente entre $|x\rangle$ et $|p\rangle$? Nous verrons naturellement comment introduire ces relations dans la section suivante.

Autre représentation de l'opérateur \hat{p}

Cherchons maintenant l'expression de \hat{p} dans la représentation x .

Pour cela, écrivons la valeur moyenne de l'opérateur \hat{p} de deux manières différentes, l'un dans la représentation x , l'autre dans la représentation p :

$$\langle \hat{p} \rangle = \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \langle x | \hat{p} | \psi \rangle dx \quad (18)$$

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \iint dp dp' \tilde{\psi}^*(p') \tilde{\psi}(p) \langle p' | \hat{p} | p \rangle = \int \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) dp. \quad (19)$$

où on a utilisé pour Eq.(19) $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ et $\langle p'|p\rangle = \delta(p - p')$. Maintenant utilisons pour cela la relation de Plancherel:

$$\int_{\mathbb{R}} f_1^*(x) f_2(x) dx = \int_{\mathbb{R}} g_1^*(p) g_2(p) dp \quad (20)$$

avec $f_1^*(x) = \psi^*(x)$ et $f_2(x) = \langle x | \hat{p} | \psi \rangle$ dans l'Eq. (18), et $g_{1,2}$ sont respectivement les transformées de Fourier de $f_{1,2}$. On trouve alors:

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x) \langle x | \hat{p} | \psi \rangle dx = \int \tilde{\psi}^*(p) \left(\int e^{ixp} \langle x | \hat{p} | \psi \rangle dx \right) dp \quad (21)$$

En identifiant avec l'Eq. (19), on obtient:

$$p \tilde{\psi}(p) = \int e^{ixp} \langle x | \hat{p} | \psi \rangle dx \quad (22)$$

En effectuant la transformée de Fourier inverse, on obtient: $\frac{1}{-i} \frac{d}{dx} (\int \tilde{\psi}(p) dp e^{ixp}) = \langle x | \hat{p} | \psi \rangle$. Soit:

$$\langle x | \hat{p} | \psi \rangle = \frac{1}{-i} \frac{d}{dx} (\psi(x)). \quad (23)$$

On peut alors identifier une expression pour \hat{p} :

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (24)$$

Nb: On peut tout à fait généraliser à trois dimensions d'espace, et dans ce cas, l'opérateur impulsion peut s'écrire $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$.

1.3 Particules libres

On cherche à déterminer la relation de dispersion d'une particule libre, relation qui relie fréquence spatiale et temporelle en utilisant l'équation de Schrödinger. C'est similaire à l'électromagnétisme, où la recherche de la dispersion s'effectue également en introduisant des solutions sous la forme d'onde plane.

A faire

La dynamique d'une particule massive libre (electron non-relativiste) obéit à l'équation de Schrödinger (à 1D):

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2|\psi\rangle}{dx^2}, \quad (25)$$

où en l'absence d'interactions, le potentiel est nul, d'où le qualificatif de vide. En appliquant le bra $\langle x|$, on obtient alors:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (26)$$

On cherche les états stationnaires (indépendant du temps) sous la forme:

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}. \quad (27)$$

Soit une équation différentielle du second ordre pour $\psi(x)$

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0. \quad (28)$$

La solution peut s'écrire comme:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (29)$$

qui est la superposition de deux ondes planes se propageant selon les x positifs et négatifs. Les coefficients A, B sont déterminés à partir de conditions aux bords. L'énergie et l'impulsion de ses ondes planes sont:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (30)$$

qui correspondent à des ondes de matière, appelées aussi ondes de Broglie, où la longueur d'onde $k = 2\pi/\lambda$ est:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_c}} \quad (31)$$

Cette longueur d'onde correspond à l'interfrange observées dans les fentes de Young (le calcul complet est réalisé dans les exercices complémentaires). Plus la masse ou l'énergie cinétique de la particule est élevée, plus l'interfrange (la périodicité spatiale du profil d'interférence) est faible, à tel point que cela efface le caractère ondulatoire, et le système est bien décrit par la physique classique.

Comme décrit dans l'introduction du cours 2, la longueur de Broglie intervient également comme la taille typique du paquet d'onde pour lequel les effets quantiques résistent au sein d'un **gaz**. Si la vitesse du gaz est faible, en le refroidissant par exemple, on aura une manifestation des effets quantiques (cohérence) sur une taille plus élevée puisque la longueur de De Broglie augmente.

Davisson et Gerner: diffraction faisceaux d'électrons

La diffraction de Davisson et Germer (1927) est une expérience fondamentale qui a confirmé la nature ondulatoire des électrons, en accord avec la théorie de la mécanique quantique. Les conclusions de cette expérience ont soutenu la théorie ondulatoire de Louis de Broglie, qui avait suggéré que les particules matérielles, comme les électrons, peuvent également présenter des propriétés ondulatoires.

L'expérience de diffraction de Davisson et Germer a été conçue pour étudier la diffusion d'électrons par un cristal. Les chercheurs ont fait passer un faisceau d'électrons monocinétique à travers un cristal de nickel monocristallin, ce qui provoque une diffraction des électrons. La détection consiste à compter les électrons. Les résultats ont montré des motifs d'interférence, similaires à ceux observés lors de la diffraction des ondes lumineuses par des réseaux périodiques. On obtiendrait la même figure de diffraction à l'aide de rayons X (qui sont habituellement utilisés pour l'investigation de structures cristallographiques).

Plus tard, des expériences analogues montrent la manipulation des propriétés ondulatoires d'atomes froids, où des champs optiques sont utilisés comme des réseaux.

L'amplitude de probabilité de la particule massive, solution de l'équation de Schrödinger, peut donc s'écrire

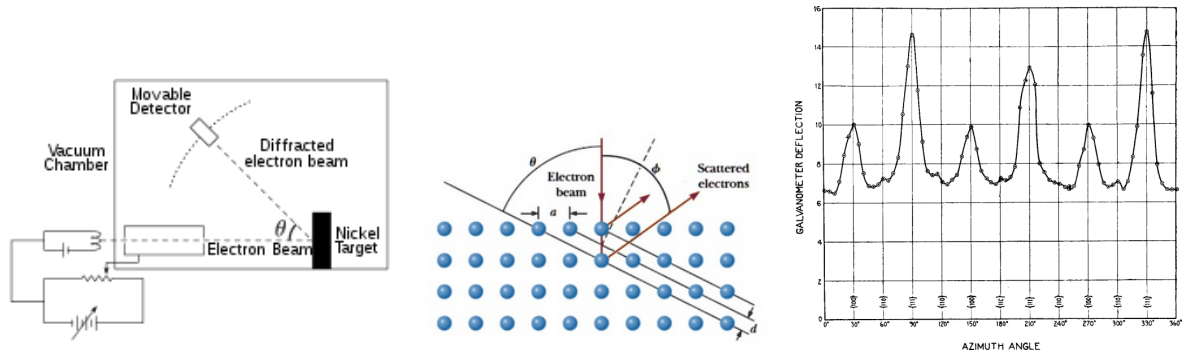


Figure 2: De Davisson, C.J. and Germer, L.H. (1927) Nature, 119, 558-560. Les particules libres massives sont ici des électrons, et sont réfléchies par un solide cristallin, le nickel. La diffraction provoquée par le réseau constitué par des atomes de nickel sur les électrons (au même titre que la diffraction de la lumière sur des grilles périodiques) donne lieu à plusieurs ordres de diffraction, dont la longueur d'onde intervenant est celle de Broglie.

comme:

$$\psi(x, t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{-iEt/\hbar}. \quad (32)$$

Decomposition en onde plane

On constate que l'onde plane $\psi(x, t)$ n'est pas normalisée à 1 car $\int_{\mathbb{R}} |\psi(x, t)|^2 dx = (|A|^2 + |B|^2) \int_{\mathbb{R}} dx = \infty$. Ce n'est donc pas une amplitude de probabilité valide.

Quid alors de leur existence physique? Les ondes planes sont une base de décomposition qui peut s'écrire:

$$\psi(x) = \int_{\mathbb{R}} \psi(p) e^{ipx/\hbar} \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (33)$$

qui est conforme au principe de superposition, c'est une relation très similaire à $\vec{u} = \sum_i u_i \vec{e}_i$, où $\psi(p)$ sont les coefficients de décomposition et $e^{i(px-Et)/\hbar}$ les vecteurs de la décomposition. On retrouve naturellement les relations de transformée de Fourier entre x et p . Si on a une distribution très piquée en position, on a une distribution plate en impulsion (et vice-versa). On se référera en cours d'optique ondulatoire au premier semestre pour plus de détails sur les transformées de Fourier (qui s'applique à l'amplitude de probabilité ici où à l'amplitude du champ électromagnétique vu au premier semestre).

De la relation Eq. (33), qui n'est rien d'autre que $\langle x|\psi \rangle$, on peut en déduire que la relation de transformée de Fourier est également au niveau des kets position et impulsion:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} |p\rangle e^{ipx/\hbar} dp, \quad (34)$$

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\mathbb{R}} |x\rangle e^{-ipx/\hbar} dx. \quad (35)$$

Et on trouve naturellement le produit scalaire suivant:

$$\langle p|x\rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{2\pi\hbar}. \quad (36)$$

On parle de base mutuellement impartiale, un concept important en théorie de l'information quantique.

Hamiltonien: l'observable énergie

Réécrivons l'Hamiltonien de la particule libre. On observe que avec l'aide de l'Eq. (24):

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (37)$$

Donc pour une particule libre, l'équation de Schrödinger peut s'écrire:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle = \frac{\hat{p}^2}{2m} |\psi\rangle \quad (38)$$

Les vecteurs propres de l'Hamiltonien sont donc celle de l'opérateur impulsion:

$$\hat{H} |p\rangle = \frac{p^2}{2m} |p\rangle. \quad (39)$$

Avec des valeurs propres $\frac{p^2}{2m}$ correspondant à l'énergie de la particule massive, l'Hamiltonien correspond à une observable, dont les valeurs propres sont l'énergie du système, une quantité mesurable. Lorsque le système quantique interagit avec d'autres systèmes quantiques, l'expression de l'Hamiltonien sera plus complexe. La diagonalisation de l'Hamiltonien sera la clé pour trouver ces valeurs propres, les valeurs de l'énergie mesurables.

♣ On dira également que puisque l'Hamiltonien et l'opérateur impulsion commutent $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, donc ils possèdent une base commune de vecteurs propres que l'on a notée $|p\rangle$.

1.4 Inégalité de Heisenberg

On montre que les opérateurs position et impulsion ne commutent pas:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\mathbb{I}. \quad (40)$$

A faire

Preuve: On calcule les éléments de matrice de chacun des membres de l'équation.

$$\begin{aligned} \langle x | [\hat{x}, \hat{p}] | \psi \rangle &= \langle x | \hat{x} \hat{p} | \psi \rangle - \langle x | \hat{p} \hat{x} | \psi \rangle \\ &= x(-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}) + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) \\ &= -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} + i\hbar \psi(x) + i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ &= i\hbar \psi(x) = i\hbar \langle x | \psi \rangle \end{aligned} \quad (41)$$

Puisque la preuve a été réalisée avec une fonction d'onde quelconque, cela est donc vraie sans le produit scalaire.

A l'aide de l'inégalité de Robertson, $\Delta \hat{A} \cdot \Delta \hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle [\hat{A}, \hat{B}] \right\rangle_\psi \right|$, qui sera admise, on peut en déduire:

$$\Delta \hat{x} \Delta \hat{p}_x \geq \hbar/2 \quad (42)$$

Ce n'est pas un principe d'incertitude dans le sens où l'équation de Schrödinger est déterministe. Si l'impulsion de la particule est complètement connue, $\Delta \hat{p}_x \rightarrow 0$, alors $\Delta \hat{x} \rightarrow \infty$ et la particule n'est pas localisable dans l'espace. De même, si la position $\Delta \hat{x} \rightarrow 0$, alors $\Delta \hat{p}_x \rightarrow \infty$. En soi, ce sont des conséquences d'avoir des relations de transformée de Fourier entre la position et l'impulsion, traduisant un pur caractère ondulatoire de la particule. Ce n'est pas tant d'avoir mis des chapeaux pour avoir défini des opérateurs (le fait d'en avoir mis va induire dans le formalisme un caractère ondulatoire du champ quantique décrivant l'électron). On a des relations similaires pour un champ électromagnétique qui est une onde. Pour une particule, un ballon, une voiture, on peut mesurer simultanément la position et l'impulsion.

A Exercices d'application

- (1) Soit la fonction d'onde $\psi(x) = Ae^{-bx^2}$, où A, b sont des constantes, déterminer la valeur de A tel que la fonction d'onde est normalisée. On utilisera l'intégrale de Gauss, que l'on trouvera facilement sur le web. Ecrire la fonction d'onde en représentation p .
- (2) Montrer l'orthogonalité de la base en impulsion p : $\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$.
- (3) Autre manière de montrer que $\langle p|x\rangle = e^{ipx}$, avec une équation différentielle.
- (4) Démontrer que de la relation de fermeture en p , on obtient bien $\delta(x - x') = \langle x|x'\rangle$.
- (5) Justifier que l'investigation de l'infiniment petit requiert des énergies de plus en plus grandes. On rappelle (où on apprend) que la relation entre l'énergie E et l'impulsion p pour une particule relativiste de masse m est $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$. Le LHC peut produire des jets de protons ($m_p = 1 \text{ GeV}/c^2$) jusqu'à 10^{12} eV : à quelle échelle spatiale la matière pourra être sonder?
- (6) Ecrire l'Hamiltonien de N particules massive libres (sans interaction).

B ♣ Facultatif: Trous de Young

On propose dans cette exercice d'écrire l'expérience des trous de Young à l'aide du formalisme de la mécanique quantique. L'expérience commence par un jet d'électrons décrit par la fonction d'onde $|\psi\rangle = \int \psi(x) |x\rangle dx$, qui traverse ensuite les deux fentes modélisées par un projecteur $\hat{P} = \int t(x) |x\rangle \langle x| dx$ où $t(x) = N(\text{Rect}_b(x - a) + \text{Rect}_b(x + a))$, où N est un facteur de normalisation.

- (1) Ecrire la fonction d'onde en sortie des deux fentes. Que représentent les paramètres a et b ? Les électrons sont ensuite observés en champ lointain sur un écran de distance d . En espace libre, on rappelle que la dynamique des électrons non relativistes est donné par $\hat{U}(t) = \exp(it\hat{p}^2/2m\hbar)$.
- (2) Ecrire la fonction d'onde après la propagation à une distance d des fentes.
- (3) Un écran est placé à une distance d des fentes et est résolu spatialement. On accède alors à la distribution de probabilité $P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2$. Déterminer cette distribution de probabilité.
- (4) Si l'écran (et le détecteur) est placé juste après les fentes, qu'observerait t'on?

C Compléments

Cette partie est non-exigible. Donnons l'exemple d'autres Hamiltonien pour des systèmes ayant des variables continues de position et impulsion.

- En présence d'un champ magnétique \vec{B} , il faut ajouter le terme d'énergie cinétique d'une particule chargée q , l'Hamiltonien devient:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} - q\vec{A})^2 \quad (43)$$

où \vec{A} est le potentiel vecteur tel que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$.

- En présence de deux particules libres de masse $m_{1,2}$ et de charge $q_{1,2}$ (sans champ magnétique), l'Hamiltonien total se décompose:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0|\hat{x}_1 - \hat{x}_2|} \quad (44)$$

où les deux premiers termes correspondent au cas où les deux particules seraient libres, et le dernier terme correspond à l'interaction Colombienne entre deux particules chargées.

D Correction

(1) La fonction d'onde est donnée par $\psi(x) = Ae^{-bx^2}$. Pour normaliser la fonction d'onde, nous devons calculer l'intégrale suivante et déterminer la valeur de A :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |Ae^{-bx^2}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 e^{-2bx^2} dx.$$

En factorisant $|A|^2$ hors de l'intégrale, nous obtenons

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = 1.$$

En utilisant la formule connue pour l'intégrale gaussienne $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, avec $a = 2b$, nous avons

$$|A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} = 1.$$

En représentation p , la fonction peut s'écrire comme:

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{\mathbb{R}} dx \psi(x) e^{ixp} = A \int_{\mathbb{R}} e^{-bx^2} e^{ixp} dx \quad (45)$$

On utilise maintenant l'intégrale: $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{i\beta x} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\beta^2/4a}$. On obtient alors,

$$\tilde{\psi}(p) = A \sqrt{\frac{\pi}{b}} e^{-p^2/4b} \quad (46)$$

(2) Méthode 1: Considérons les deux équations aux valeurs propres $\hat{p}|p_1\rangle = p_1|p_1\rangle$ et $\hat{p}|p_2\rangle = p_2|p_2\rangle$. On obtient:

$$\langle p_2 | \hat{p}^2 | p_1 \rangle = p_1 p_2 \langle p_2 | p_1 \rangle \quad (47)$$

et on a également

$$(p_1^2 - p_1 p_2) \langle p_2 | p_1 \rangle = 0 \quad (48)$$

soit $p_1^2 = p_1 p_2$ et $\langle p_2 | p_1 \rangle \neq 0$, ce qui donne $p_1 = p_2$, $\langle p_2 | p_1 \rangle = \delta(p_1 - p_2)$.

Méthode 2: Pour montrer l'orthogonalité de la base en impulsion $|p\rangle$, c'est-à-dire que $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$, on peut utiliser la relation de fermeture de la base q :

$$\langle p | p' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p | q \rangle \langle q | p' \rangle dq$$

En utilisant la relation $\langle q | p \rangle = e^{iqp}$ et en intégrant selon q , on démontre alors $\langle p | p' \rangle = \delta(p - p')$.

(3) Avec la relation, on a $\langle x | \hat{p} | p \rangle = p \langle x | p \rangle$, en notant $\chi_p(x) = \langle x | p \rangle$ on obtient l'équation différentielle:

$$p \chi_p(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \chi_p(x) \quad (49)$$

Et la solution est:

$$\chi_p(x) = \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (50)$$

(4) On commence de la relation de fermeture en p : $\int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle \langle p| dp = \hat{1}$, et on suppose valable que $\langle p | x \rangle = e^{ixp}$. On obtient alors:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i(x-x')p} dx = \langle x | x' \rangle \quad (51)$$

Et par integration, on obtient: $\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{i(x-x')p} dx = \delta(x - x') = \langle x | x' \rangle$.

(5) La mécanique quantique postule que la position et l'impulsion d'une particule ne peuvent pas être mesurées de manière précise en même temps. Plus on veut connaître la position avec précision, plus l'impulsion devient incertaine, et vice versa. Cela implique que pour sonder des distances de plus en plus petites, des énergies de plus en plus élevées sont nécessaires. L'équation $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$ montre que l'énergie augmente avec l'impulsion, et à des énergies relativistes, la contribution de l'impulsion devient significative.

Trous de Young

(1) Un électron non relativiste est décrit par la fonction d'onde :

$$|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi(x) |x\rangle dx \quad (52)$$

Après les fentes, elle devient :

$$\hat{P}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi(x)t(x) |x\rangle dx \quad (53)$$

$2a$ représente la distance entre les fentes, et b la largeur de la fente (responsable de la diffraction). Après une telle opération de filtrage, la fonction d'onde n'est plus normée à un. La fonction d'onde physique s'écrit:

$$|\psi\rangle_{out} = \frac{\hat{P}|\psi\rangle}{\|\hat{P}|\psi\rangle\|} = \frac{\int_{\mathbb{R}} \psi(x)t(x) |x\rangle dx}{(\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx)^{1/2}} \quad (54)$$

(2) La propagation du photon unique des fentes à l'écran est décrite par l'opérateur d'évolution.

$$|\psi\rangle = \frac{1}{(\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} \psi(x)t(x) e^{-ip^2/(2m)t} |x\rangle dx \quad (55)$$

C'est une opération unitaire, pas de renormalisation nécessaire. Nous introduisons la relation surcomplète de l'état p pour pouvoir appliquer l'opérateur \hat{p} :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{(\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx)^{1/2}} \iint \psi(x')t(x') e^{-ip^2/2m\hbar} e^{ipx'/\hbar} |p\rangle dp dx' \quad (56)$$

Ensuite, l'état est mesuré sur l'écran, et nous mesurons la position x de l'électron :

$$P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \frac{\left| \iint \psi(x')t(x') e^{-ip^2/2m\hbar} e^{ip(x'-x)/\hbar} dp dx' \right|^2}{(\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx)^{1/2}} \quad (57)$$

En utilisant l'intégrale Gaussienne,

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-ip^2/2m\hbar} e^{ip(x'-x)/\hbar} dp = \sqrt{\frac{2m\hbar}{it}} e^{i\frac{(x-x')^2}{8m\hbar t}} \quad (58)$$

Nous obtenons :

$$P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \frac{2m\hbar}{t \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx} \left| \int_{\mathbb{R}} \psi(x')t(x') e^{i\frac{(x-x')^2}{8m\hbar t}} dx' \right|^2 \quad (59)$$

La durée t de propagation est liée à la distance d par $d = ct$. La quantité $e^{i\frac{(x-x')^2}{8m\hbar t}}$ est un propagateur décrivant la diffraction du photon unique. Une quantité similaire se retrouve pour la description de la diffraction des ondes électromagnétiques: cela correspond au propagateur de Fresnel. Nous allons faire l'approximation de champ lointain qui consiste à négliger le terme en x'^2 devant le terme croisé xx' . Cela donne:

$$P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \frac{2m\hbar}{t \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx} \left| \int_{\mathbb{R}} \psi(x')t(x') e^{i\frac{xx'}{4m\hbar t}} dx' \right|^2 \quad (60)$$

On se retrouve alors avec une relation de transformée de Fourier, valide en champ lointain (approximation de Fraunhofer, voir COM101).

(3) Calculons la densité de probabilité pour des fentes rectangulaires. Commençons par un état simple, non physique (car non normalisable) d'une onde plane. Il vaut mieux ajouter couche par couche en complexité.

$$P(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 = \frac{2m\hbar}{t \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)t(x)|^2 dx} \left| \int_{-a-b}^{-a+b} e^{i\frac{xx'}{4m\hbar t}} + \int_{a-b}^{a+b} e^{i\frac{xx'}{4m\hbar t}} dx' \right|^2 \quad (61)$$

Et les calculs peuvent se poursuivre.

(4) On observe seulement la probabilité de passage de l'électron à travers la fente. La figure d'interférence est supprimée, car on utilise un moyen pas très subtil pour indiquer par quel fente l'électron est passé. Le champ lointain permet de faire recouvrir les deux cones de diffraction deux aux fentes, qui s'interprètent ici comme la zone où on ne sait pas si l'électron est passé par la fente 1 ou 2.