TD opérateurs et mesure

Objectifs

- Manipuler les fonctions d'onde $\psi(x)$ parallèlement aux vecteurs $|\psi\rangle$.
- Relier la mesure aux opérateurs.
- Valeurs propres et vecteurs propres de $\hat{X}$ et $\hat{P}$

I Rappels

- Fonctions d'onde = fonctions de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{C}$, de carré sommable. L'ensemble de ces fonctions est un espace vectoriel, les états sont des vecteurs (normés) de cet espace, avec la notation particulière $|\psi\rangle$.
- Norme et produit scalaire :

$$\|\psi\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2\, dx \qquad \langle\varphi|\,\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} \varphi^*(x)\,\psi(x)\,dx = \langle\psi|\,\varphi\rangle^*$$

- Relation de fermeture, cas d'une base discrète $\{|\phi_n\rangle\}$.

$$\sum_n |\phi_n\rangle\,\langle\phi_n| = \text{identité}$$

II Lien entre fonction d'onde et mesure de position

Une particule quantique dans un espace 1D est dans un état caractérisé par la fonction d'onde $\psi : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{C}$.

Question 1 Si on veut mesurer la position de la particule, quels sont les résultats possibles et leur distribution de probabilité (en fonction de ψ) ? Écrire les formules donnant l'espérance de la position $\langle x\rangle$ et son écart-type σ_x.

Réponse 1 Les résultats possibles sont toutes les valeurs de $\mathbb{R}$ (toutes les positions dans un espace 1D). La probabilité de trouver une valeur dans l'intervalle $[x, x+dx[$ est $|\psi(x)|^2\,dx$, par définition de la fonction d'onde. (Réponse alternative : les résultats possibles sont tous les x pour lesquels $\psi(x) \neq 0$.)

$$\langle x\rangle = \int_{\mathbb{R}} x \cdot |\psi(x)|^2\,dx$$
$$\sigma_x^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \langle x\rangle)^2 \cdot |\psi(x)|^2\,dx = \int_{\mathbb{R}} x^2 \cdot |\psi(x)|^2\,dx - \langle x\rangle^2$$

Question 2 Rappeler le principe de la mesure d'une grandeur physique en mécanique quantique en termes d'opérateurs linéaires.

Réponse 2 À chaque grandeur physique $\mathcal{A}$ on associe un opérateur linéaire $\hat{A}$. Les résultats possibles de la mesure sont les valeurs propres de $\hat{A}$. La probabilité de trouver la valeur a est $\left|\frac{\langle\varphi_a|\,\psi\rangle}{||\varphi_a||\cdot||\psi||}\right|^2$, où $|\psi\rangle$ est l'état de la particule qu'on mesure et $|\varphi_a\rangle$ le vecteur propre de $\hat{A}$ associé à la valeur propre a. On fera généralement en sorte que ces vecteurs soient normés, auquel cas la probabilité s'écrit $|\langle\varphi_a|\,\psi\rangle|^2$. Une fois la mesure faite, le système est « projeté » dans l'état $|\varphi_a\rangle$.

(Note : dans le cas où les valeurs propres de $\hat{A}$ forment une famille continue — par exemple si tous les $a \in \mathbb{R}$ sont possibles — alors $|\langle\varphi_a|\,\psi\rangle|^2$ sera en fait une densité de probabilité.)

On définit un opérateur linéaire $\hat{X}$ défini pour tout $|\psi\rangle$ par :

$$\hat{X}\,|\psi\rangle = |\varphi\rangle\,,\text{où : } \varphi(x) = x\psi(x) \tag{1}$$

Question 3 Quels sont les vecteurs propres de $\hat{X}$ et les valeurs propres associées ? Relier les réponses aux questions 1 et 2 en montrant que $\hat{X}$ est bien l'opérateur associé à la position. À quoi correspondent les valeurs $\left\langle\psi\right|\hat{X}\left|\psi\right\rangle$ et $\left\langle\psi\right|\hat{X}^2\left|\psi\right\rangle$?

Réponse 3 Un vecteur propre de $\hat{X}$ devrait être nul partout sauf en une certaine position x_0, qui serait aussi la valeur propre associée. C'est forcément δ_{x_0}, la distribution de Dirac centrée en x_0 :

$$\forall x \in \mathbb{R}, x\delta_{x_0}(x) = x_0\delta_{x_0}(x)$$
$$\hat{X}\,|\delta_{x_0}\rangle = x_0\,|\delta_{x_0}\rangle$$

On peut aussi le comprendre physiquement : chercher les vecteurs propres de $\hat{X}$ revient à chercher les états d'une particule où la position est complètement déterminée. La fonction d'onde serait infiniment fine, ce qui correspond bien à une distribution de Dirac.

Calculons la (densité de) probabilité de mesurer la position x_0, en supposant $|\psi\rangle$ et $|\delta_{x_0}\rangle$ normés :

$$\begin{aligned}\text{proba}(x_0) &= |\langle\delta_{x_0}|\,\psi\rangle|^2 \\ &= \left|\int_{\mathbb{R}} \delta_{x_0}^*(x)\psi(x)\,dx\right|^2 \\ &= |\psi(x_0)|^2\end{aligned}$$

On retrouve bien la définition de la fonction d'onde.

Note : on suppose pouvoir passer de manière évidente des probabilités (dans le cas de valeurs propres discrètes) aux distributions de probabilités (dans le cas de valeurs propres continues, ce qui est le cas pour $\hat{X}$).

On peut également réécrire l'espérance et l'écart-type :

$$\left\langle\psi\right|\hat{X}\left|\psi\right\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\cdot x\psi(x)\,dx = \langle x\rangle$$
$$\left\langle\psi\right|\hat{X}^2\left|\psi\right\rangle = \int_{\mathbb{R}} \psi^*(x)\cdot x^2\psi(x)\,dx = \sigma_x^2 + \langle x\rangle^2$$

III Particule libre

On continue de s'intéresser à une particule quantique dans un espace 1D. On la suppose maintenant de masse m, et libre (i.e. dans un potentiel uniformément nul, énergie purement cinétique).

Question 4 Rappeler quels sont les états stationnaires de ce système et leur énergie.

Réponse 4 Ce sont les ondes planes $\varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx}$ avec $E = E_c = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$.

Question 5 En physique classique, en plus de l'énergie, quelle est l'autre grandeur physique qui se conserve au cours du temps pour une particule libre ? Exprimer l'énergie de la particule libre en fonction de cette grandeur.

Réponse 5 C'est la quantité de mouvement p (1è loi de Newton). $E = E_c = \frac{p^2}{2m}$.

Question 6 Si l'on appelle $\hat{P}$ l'opérateur associé à cette grandeur physique, déduire des réponses aux questions 4 et 5 un lien entre les vecteurs propres de $\hat{P}$ et les états stationnaires de la particule libre. Ecrire l'action de $\hat{P}$ sur les états stationnaires de la particule libre.

Réponse 6 Vu que la quantité de mouvement p se conserve dans le temps, les états stationnaires $|\varphi_k\rangle$ doivent avoir p déterminée, c'est-à-dire être également vecteurs propres de $\hat{P}$. Formellement, $\hat{H}$ commute avec $\hat{P}$ et ils ont donc une base de vecteurs propres communs. On trouve l'expression des valeurs propres de $\hat{P}$ soit par la loi de de Broglie, soit par l'expression de l'énergie à la réponse 4 : $p = \hbar k$.

En résumé, les états stationnaires sont vecteurs propres de $\hat{P}$, avec la valeur propre correspondant à la quantité de mouvement :

$$\hat{P}\,|\varphi_k\rangle = \hbar k\,|\varphi_k\rangle$$

IV Mesure de p et expression de $\hat{P}$

La particule dans un espace 1D n'est plus supposée libre, mais l'expression mathématique de $\hat{P}$ trouvée ci-dessus reste valable. On continue d'appeler ψ la fonction d'onde de la particule, et on la relie à transformée de Fourier $\bar{\psi}$:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \bar{\psi}(k)\, e^{ikx}\, dk \tag{2}$$

(L'égalité de Parseval garantit que $\bar{\psi}$ est normée si ψ l'est : $\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2\, dx = \int_{\mathbb{R}} |\bar{\psi}(k)|^2\, dk = 1$.)

Question 7 Justifier que l'équation (2) est la décomposition de $|\psi\rangle$ sur une base orthogonale de vecteurs propres de $\hat{P}$ $\{|\varphi_k\rangle\}_{k\in\mathbb{R}}$.

Réponse 7 À la question 6, on a construit $\hat{P}$ de façon à ce qu'il ait pour vecteurs propres les ondes planes, que l'on reconnaît sous l'intégrale équation (2). C'est une décomposition sur une famille de vecteurs, au même titre qu'écrire une somme $\sum_{n=1}^{N} v_n \vec{e_n}$ en dimension finie. Les $\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}$ forment bien une base car toutes les fonctions de carré sommable ont une transformée de Fourier. Quant à l'orthogonalité, on trouve via la TF que : $\langle \varphi_{k_1} | \, \varphi_{k_2} \rangle = \delta(k_2 - k_1)$. De fait, deux vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes d'un même opérateur sont forcément orthogonaux. C'est d'ailleurs nécessaire à la cohérence du modèle de la mécanique quantique : un état où la grandeur physique a une valeur bien définie ne peut pas se projeter sur un état où elle a une autre valeur.

Question 8 Quelle est la (densité de) probabilité de mesurer une valeur donnée p_0 ?

(Indice pour aider au calcul : on rappelle que deux vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes d'un même opérateur sont forcément orthogonaux ; avec des variables continues, cela s'écrit : $\left\langle \phi_{p_1} \middle| \, \phi_{p_2} \right\rangle \propto \delta(p_2 - p_1)$.)

Réponse 8 Posons comme d'habitude $p_0 = \hbar k_0$. On sait que l'état propre associé à cette valeur est l'onde plane $|\varphi_{k_0}\rangle$ avec, d'après la question 4 : $\varphi_{k_0}(x) = \frac{e^{ik_0 x}}{\sqrt{2\pi}}$. La probabilité cherchée est la projection de $|\psi\rangle$ sur $|\varphi_{k_0}\rangle$: $|\langle\varphi_{k_0}|\,\psi\rangle|^2$. Or on reconnaît dans l'équation (2) une décomposition de $|\psi\rangle$ sur les ondes planes que l'on peut utiliser :

$$\begin{aligned}\langle\varphi_{k_0}|\,\psi\rangle &= \langle\varphi_{k_0}|\int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\,|\varphi_k\rangle\;dk\\ &= \int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\,\langle\varphi_{k_0}|\,\varphi_k\rangle\;dk\\ &= \int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\delta(k-k_0)\,dk && \text{(orthogonalité)}\\ &= \bar{\psi}(k_0)\end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}\text{densité proba}(k_0) &= |\bar{\psi}(k_0)|^2\\ \text{densité proba}(p_0) &= \frac{1}{\hbar}\left|\bar{\psi}\left(\frac{p_0}{\hbar}\right)\right|^2\end{aligned}$$

Question 9 Justifier que $\bar{\psi}$ porte aussi le nom de « fonction d'onde » en « représentation p », par analogie à ψ en « représentation x ».

Réponse 9 Vu la réponse à la question précédente, $\bar{\psi}$ est à p (ou plus précisément k) ce que ψ est à x : une amplitude de probabilité pour la mesure de la grandeur physique associée.

Question 10 Si on pose : $|\Phi\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle$, montrer que : $\Phi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$

Réponse 10 On utilise à nouveau la décomposition de l'équation (2) :

$$\begin{aligned}|\Phi\rangle = \hat{P}\,|\psi\rangle &= \hat{P}\int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\,|\varphi_k\rangle\;dk\\ &= \int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\hat{P}\,|\varphi_k\rangle\;dk\\ &= \int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\,\hbar k\,|\varphi_k\rangle\;dk\end{aligned}$$

On repasse en représentation x :

$$\begin{aligned}\Phi(x) = \langle\delta_x|\,\hat{P}\,|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\,\hbar k\,\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}\,dk\\ &= -i\hbar\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}}\bar{\psi}(k)\,\frac{\partial}{\partial x}e^{ikx}\,dk\\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)\end{aligned}$$

Question 11 Constater que $\hat{X}\hat{P}|\psi\rangle$ n'est pas égal à $\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle$, en passant par la représentation x. Calculer la différence, en déduire que : $\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X} = i\hbar\cdot$ (identité).

Réponse 11 En représentation x :

$$\begin{aligned}\hat{X}\hat{P}\,|\psi\rangle &\quad\rightarrow\quad x\cdot(-i\hbar)\frac{\partial\psi}{\partial x}\\ \hat{P}\hat{X}\,|\psi\rangle &\quad\rightarrow\quad -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) = -i\hbar\psi(x) - x\cdot i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\end{aligned}$$

Dans le détail, on calcule en fait $\langle\delta_x|\,(\hat{X}\hat{P}-\hat{P}\hat{X})\,|\psi\rangle = \langle\delta_x|\,\hat{X}\hat{P}\,|\psi\rangle - \langle\delta_x|\,\hat{P}\hat{X}\,|\psi\rangle$. On utilise la relation de fermeture :

$$\begin{aligned}
\langle\delta_x|\,\hat{X}\hat{P}\,|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}} \langle\delta_x|\,\hat{X}\,|\delta_{x_1}\rangle\,\langle\delta_{x_1}|\,\hat{P}\,|\psi\rangle\,dx_1 \\
&= \int_{\mathbb{R}} \delta(x-x_1)x_1\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\psi(x_1)\right)dx_1 \\
&= (-i\hbar)x\frac{\partial\psi}{\partial x}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\delta_x|\,\hat{P}\hat{X}\,|\psi\rangle &= \int_{\mathbb{R}} \langle\delta_x|\,\hat{P}\,|\delta_{x_1}\rangle\,\langle\delta_{x_1}|\,\hat{X}\,|\psi\rangle\,dx_1 \\
&= \int_{\mathbb{R}} \delta(x-x_1)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_1}\right)(x_1\psi(x_1))dx_1 \\
&= -i\hbar\psi(x) - x\cdot i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}
\end{aligned}$$

On voit bien que les opérateurs ne commutent pas.

L'opérateur $\hat{X}\hat{P}-\hat{P}\hat{X}$, appelé ***commutateur*** et noté $[\hat{X},\hat{P}]$, se trouve en constatant que la différence entre les formules ci-dessus est $i\hbar\psi(x)$, et ce quelle que soit ψ. Par conséquent :

$$[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar\cdot\text{identité}$$