Représentation position/impulsion, relation d'incertitude d'Heisenberg

Exercice 1 (représentations position et implusion - modèle 1D). On considère une particule quantique de masse $m > 0$ dans $\mathbb{R}$ soumise à un potentiel extérieur $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ borné et régulier.

En représentation position, ce système physique est décrit par
— l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_{\mathrm{pos}} := L^2_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ (l'indice "pos" signifie qu'on travaille en représentation position) ;
— une famille d'observables (i.e. d'opérateurs auto-adjoints sur $\mathcal{H}$) décrivant ses propriétés physiques, parmi lesquelles les observables position, impulsion (quantité de mouvement), énergie cinétique, énergie potentielle et énergie totale, définies dans cette représentation par

1. $\widehat{x}_{\mathrm{pos}}$: opérateur de multiplication par la fonction x, i.e. $(\widehat{x}_{\mathrm{pos}}\psi)(x) = x\psi(x)$,
2. $\widehat{p}_{\mathrm{pos}} = -i\hbar\frac{d}{dx}$,
3. $\widehat{T}_{\mathrm{pos}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$,
4. $\widehat{V}_{\mathrm{pos}}$: opérateur de multiplication par la fonction $V(x)$,
5. $\widehat{H}_{\mathrm{pos}} = \widehat{T}_{\mathrm{pos}} + \widehat{V}_{\mathrm{pos}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$ (Hamiltonien du sytème).

La transformée de Fourier par rapport à la variable d'espace utilisée en mécanique quantique est définie sur $L^1_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ par

$$\forall \psi_{\mathrm{pos}} \in L^1_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C}), \quad (\mathcal{F}\psi_{\mathrm{pos}})(p) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} \psi_{\mathrm{pos}}(x)\, e^{-i\frac{px}{\hbar}}\, dx.$$

On peut montrer (voir cours d'analyse de Fourier de 2A) que la restriction de $\mathcal{F}$ à $L^1_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C}) \cap L^2_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ sétend par densité de manière unique en une application linéaire continue de $L^2_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ dans $L^2_{\mathrm{imp}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ (espace L^2 en représentation impulsion), encore notée $\mathcal{F}$ pour simplifier, et que l'application linéaire $\mathcal{F}$ ainsi définie est un opérateur unitaire (i.e. une isométrie bijective) de $L^2_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ dans $L^2_{\mathrm{imp}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$. La transformée de Fourier inverse est donnée sur $L^1_{\mathrm{imp}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$ par

$$\forall \psi_{\mathrm{pos}} \in L^1_{\mathrm{imp}}(\mathbb{R};\mathbb{C}), \quad (\mathcal{F}^{-1}\psi_{\mathrm{imp}})(x) := \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} \psi_{\mathrm{imp}}(p)\, e^{i\frac{px}{\hbar}}\, dp.$$

De plus, la transformée de Fourier d'une gaussienne est une gaussienne :

$$\mathcal{F}\left(\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-x^2/4\sigma^2}\right)(p) = \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\sigma^2 p^2/\hbar^2}.$$

On rappelle enfin que

$$\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} e^{-y^2/2\sigma^2}\, dy = 1, \quad \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} y e^{-y^2/2\sigma^2}\, dy = 0 \quad \text{et} \quad \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{\mathbb{R}} y^2 e^{-y^2/2\sigma^2}\, dy = \sigma^2.$$

En représentation impulsion, l'espace de l'Hilbert associé au système est $\mathcal{H}_{\mathrm{imp}} = L^2_{\mathrm{imp}}(\mathbb{R};\mathbb{C}) = \mathcal{F}L^2_{\mathrm{pos}}(\mathbb{R};\mathbb{C})$. Le passage d'une représentation à l'autre pour les états se fait par la règle : $\psi_{\mathrm{imp}} = \mathcal{F}\psi_{\mathrm{pos}}$.

1.1 Comme doivent se transformer les observables lors du passage de la représentation position à la représentation impulsion afin de garantir que la quantité physique $\langle\psi|\widehat{A}|\psi\rangle$ (valeur moyenne de la quantité mesurée A si le système est dans l'état ψ) soit la même dans les deux représentations quelle que soit l'observable $\widehat{A}$ et quel que soit l'état ψ ?

Soit A une quantité physique. On doit avoir pour tout ψ_{pos}

$$\begin{aligned}\langle\psi_{\text{pos}}|\widehat{A}_{\text{pos}}|\psi_{\text{pos}}\rangle &= \langle\psi_{\text{imp}}|\widehat{A}_{\text{imp}}|\psi_{\text{imp}}\rangle = \langle\mathcal{F}\psi_{\text{pos}}|\widehat{A}_{\text{imp}}|\mathcal{F}\psi_{\text{pos}}\rangle \\ &= \langle\mathcal{F}\psi_{\text{pos}}|\widehat{A}_{\text{imp}}\mathcal{F}\psi_{\text{pos}}\rangle = \langle\psi_{\text{pos}}|\mathcal{F}^{-1}\widehat{A}_{\text{imp}}\mathcal{F}\psi_{\text{pos}}\rangle = \langle\psi_{\text{pos}}|\mathcal{F}^{-1}\widehat{A}_{\text{imp}}\mathcal{F}|\psi_{\text{pos}}\rangle.\end{aligned}$$

D'où $\widehat{A}_{\text{pos}} = \mathcal{F}^{-1}\widehat{A}_{\text{imp}}\mathcal{F}$, soit de façon équivalente $\widehat{A}_{\text{imp}} = \mathcal{F}\widehat{A}_{\text{pos}}\mathcal{F}^{-1}$.

1.2 On considère le paquet d'onde gaussien normalisé en représentation position

$$\psi_{\text{pos}}(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\, e^{ip_0x/\hbar}\, e^{-|x-x_0|^2/4\sigma^2}. \tag{1}$$

Calculer $\langle\psi|\widehat{x}|\psi\rangle$ et $\Delta x = (\langle\psi|\widehat{x}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\widehat{x}|\psi\rangle^2)^{1/2}$.

En effectuant le calcul de $\langle\psi|\widehat{x}|\psi\rangle$ en représentation position, il vient

$$\begin{aligned}\langle\psi|\widehat{x}|\psi\rangle = \langle\psi_{\text{pos}}|\widehat{x}_{\text{pos}}|\psi_{\text{pos}}\rangle &= \int_{\mathbb{R}} x|\psi_{\text{pos}}(x)|^2\,dx = \int_{\mathbb{R}} x\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\, e^{-|x-x_0|^2/2\sigma^2}\,dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}(y+x_0)\,e^{-y^2/2\sigma^2}\,dy = x_0\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\langle\psi|\widehat{x}^2|\psi\rangle = \langle\psi_{\text{pos}}|\widehat{x}^2_{\text{pos}}|\psi_{\text{pos}}\rangle &= \int_{\mathbb{R}} x^2|\psi_{\text{pos}}(x)|^2\,dx = \int_{\mathbb{R}} x^2\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\, e^{-|x-x_0|^2/2\sigma^2}\,dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}(y+x_0)^2\,e^{-y^2/2\sigma^2}\,dy = \sigma^2 + x_0^2.\end{aligned}$$

D'où $\Delta x = \sigma$.

1.3 Calculer $\psi_{\text{imp}}(p) = (\mathcal{F}\psi_{\text{pos}})(p)$ et $\widehat{p}_{\text{imp}}$ et en déduire les valeurs de $\langle\psi|\widehat{p}|\psi\rangle$ et $\Delta p = (\langle\psi|\widehat{p}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\widehat{p}|\psi\rangle^2)^{1/2}$ lorsque la particule est dans l'état (1). Conclure.

On a

$$\begin{aligned}\psi_{\text{imp}}(p) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}\psi_{\text{pos}}(x)\,e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,e^{ip_0x/\hbar}\,e^{-|x-x_0|^2/4\sigma^2}\,e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,e^{-|x-x_0|^2/4\sigma^2}\,e^{-i\frac{(p-p_0)x}{\hbar}}\,dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,e^{-|x|^2/4\sigma^2}\,e^{-i\frac{(p-p_0)(x+x_0)}{\hbar}}\,dx \\ &= e^{-i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar}}\,\mathcal{F}\left(\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}e^{-x^2/4\sigma^2}\right)(p-p_0) \\ &= e^{-i\frac{(p-p_0)x_0}{\hbar}}\left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4}\,e^{-\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}.\end{aligned}$$

Par ailleurs, pour tout $\psi_{\text{imp}} \in C_c^\infty(\mathbb{R})$, on obtient en intégrant par parties

$$\begin{aligned}(\widehat{p}_{\text{imp}}\psi_{\text{imp}})(p) &= (\mathcal{F}\widehat{p}_{\text{pos}}\mathcal{F}^{-1}\psi_{\text{imp}})(p) = (\mathcal{F}(\widehat{p}_{\text{pos}}\psi_{\text{pos}}))(p) \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}\left(-i\hbar\frac{d\psi_{\text{pos}}}{dx}(x)\right)\,e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,dx = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int_{\mathbb{R}}\psi_{\text{pos}}(x)\,p\,e^{-i\frac{px}{\hbar}}\,dx = p\psi_{\text{imp}}(p).\end{aligned}$$

Donc $\widehat{p}_{\text{imp}}$ est l'opérateur de multiplication par p. Il en résulte que si la particule est dans l'état (1),

$$\langle\psi|\widehat{p}|\psi\rangle = \langle\psi_{\text{imp}}|\widehat{p}_{\text{imp}}|\psi_{\text{imp}}\rangle = \int_{\mathbb{R}} p\left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2}\,e^{-2\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}\,dp = \int_{\mathbb{R}}(q+p_0)\left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2}\,e^{-2\sigma^2q^2/\hbar^2}\,dp = p_0$$

et

$$\langle\psi|\widehat{p}^2|\psi\rangle = \langle\psi_{\mathrm{imp}}|\widehat{p}_{\mathrm{imp}}^2|\psi_{\mathrm{imp}}\rangle = \int_{\mathbb{R}} p^2 \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} e^{-2\sigma^2(p-p_0)^2/\hbar^2}\,dp$$
$$= \int_{\mathbb{R}} (q+p_0)^2 \left(\frac{2\sigma^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/2} e^{-2\sigma^2 q^2/\hbar^2}\,dp = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2} + p_0^2.$$

D'où $\Delta p = \frac{\hbar}{2\sigma}$. On en déduit que $\Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}$. On peut montrer (voir exercice suivant) que pour tout état ψ, $\Delta x\,\Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (relation d'incertitude d'Heisenberg). Les paquets d'ondes gaussiens correspondent donc au cas limite, et ce sont en fait les seuls états pour lesquels on a égalité.

Exercice 2 (relation d'incertitude d'Heisenberg). On considère un système quantique fermé isolé décrit par

— un espace de Hilbert (complexe séparable) $\mathcal{H}$;

— une famille $\mathcal{A}$ d'observables décrivant les propriétés physiques du système.

Soit Ψ un vecteur normalisé de $\mathcal{H}$ et $\widehat{A} \in \mathcal{A}$ une observable associée à la grandeur physique A. On rappelle que lorsque le système est dans l'état normalisé Ψ, la moyenne de A vaut $\langle\Psi|\widehat{A}|\Psi\rangle$, sa variance $\langle\Psi|\widehat{A}^2|\Psi\rangle$, et son écart type

$$\Delta A = \left(\langle\Psi|\widehat{A}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\widehat{A}|\Psi\rangle^2\right)^{1/2}.$$

2.1 Calculer ΔA si Ψ est un état propre de $\widehat{A}$.

Supposons que $\widehat{A}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$. On a alors $\widehat{A}^2|\Psi\rangle = \lambda^2|\Psi\rangle$ et donc, comme $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$,

$$\Delta A = \left(\langle\Psi|\widehat{A}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\widehat{A}|\Psi\rangle^2\right)^{1/2} = \left(\langle\Psi|\lambda^2\Psi\rangle - \langle\Psi|\lambda\Psi\rangle^2\right)^{1/2} = 0.$$

2.2 On suppose que $\widehat{A}_1$ et $\widehat{A}_2$ sont deux observables de $\mathcal{A}$ bornées et $\Psi \in \mathcal{H}$ un état normalisé. On pose

$$a_1 = \langle\Psi|\widehat{A}_1|\Psi\rangle \quad \text{et} \quad a_2 = \langle\Psi|\widehat{A}_2|\Psi\rangle.$$

a) Vérifier que $i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2]$, où $[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$ est le commutateur de $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$, est un opérateur auto-adjoint.

En utilisant le fait que pour toutes observables $\widehat{A}$ et $\widehat{B}$, $\widehat{A}^\dagger = \widehat{A}$ et $(\widehat{A}\widehat{B})^\dagger = \widehat{B}^\dagger\widehat{A}^\dagger = \widehat{B}\widehat{A}$, il vient

$$(i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2])^\dagger = (i(\widehat{A}_1\widehat{A}_2 - \widehat{A}_2\widehat{A}_1))^\dagger = -i(\widehat{A}_2^\dagger\widehat{A}_1^\dagger - \widehat{A}_1^\dagger\widehat{A}_2^\dagger) = -i(\widehat{A}_2\widehat{A}_1 - \widehat{A}_1\widehat{A}_2) = i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2].$$

b) Vérifier que $[\widehat{A}_1 - a_1, \widehat{A}_2 - a_2] = [\widehat{A}_1, \widehat{A}_2]$ et en déduire que

$$\langle\Psi|i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2]|\Psi\rangle = -2\mathrm{Im}\left(\langle(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi|(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi\rangle\right).$$

Comme a_1 et a_2 sont des scalaires, ils commutent avec tous les opérateurs, et on a

$$\begin{aligned}[\widehat{A}_1 - a_1, \widehat{A}_2 - a_2] &= (\widehat{A}_1 - a_1)(\widehat{A}_2 - a_2) - (\widehat{A}_2 - a_2)(\widehat{A}_1 - a_1) \\ &= \widehat{A}_1\widehat{A}_2 - a_1\widehat{A}_2 - \widehat{A}_1 a_2 + a_1 a_2 - \widehat{A}_2\widehat{A}_1 + a_2\widehat{A}_1 + \widehat{A}_2 a_1 - a_2 a_2 \\ &= \widehat{A}_1\widehat{A}_2 - \widehat{A}_2\widehat{A}_1 = [\widehat{A}_1, \widehat{A}_2],\end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned}\langle\Psi|i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2]|\Psi\rangle = \langle\Psi|i[\widehat{A}_1 - a_1, \widehat{A}_2 - a_2]|\Psi\rangle &= \langle\Psi|i(\widehat{A}_1 - a_1)(\widehat{A}_2 - a_2) - i(\widehat{A}_2 - a_2)(\widehat{A}_1 - a_1)|\Psi\rangle \\ &= i\langle(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi|(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi\rangle - i\langle(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi|(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi\rangle \\ &= i\left(\langle(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi|(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi\rangle - \overline{\langle(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi|(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi\rangle}\right) \\ &= -2\mathrm{Im}\left(\langle(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi|(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi\rangle\right).\end{aligned}$$

c) Vérifier que $\|(\widehat{A}_j - a_j)\Psi\|^2 = \Delta A_j^2$ et en déduire l'inégalité

$$\Delta A_1 \, \Delta A_2 \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2] | \Psi \rangle| \qquad \text{(relation d'incertitude d'Heisenberg).} \tag{2}$$

On admettra que (2) reste vrai même si les opérateurs $\widehat{A}_1$ et $\widehat{A}_2$ sont non bornés (dans ce cas, le membre de gauche, voire les deux membres de l'inégalité, peuvent valoir $+\infty$ pour certains Ψ).

On a

$$|\langle \Psi | i[\widehat{A}_1, \widehat{A}_2] | \Psi \rangle| = 2 \left| \mathrm{Im} \left(\langle (\widehat{A}_1 - a_1)\Psi | (\widehat{A}_2 - a_2)\Psi \rangle \right) \right| \leq 2 \|(\widehat{A}_1 - a_1)\Psi\| \, \|(\widehat{A}_2 - a_2)\Psi\|$$

et

$$\|(\widehat{A}_j - a_j)\Psi\|^2 = \langle (\widehat{A}_j - a_j)\Psi | (\widehat{A}_j - a_j)\Psi \rangle = \langle \Psi | (\widehat{A}_j - a_j)^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | \widehat{A}_j^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | \widehat{A}_j | \Psi \rangle^2 = \Delta A_j^2.$$

D'où l'inégalité (2).

2.3 On reprend le système quantique introduit dans l'exercice 1. Calculer $[\widehat{x}, \widehat{p}]$, et en déduire de la relation d'incertitude d'Heisenberg pour les opérateur de position de d'impulsion.

On a (en représentation position)

$$([\widehat{x}, \widehat{p}]\Psi)(x) = x \left(-i\hbar \frac{d\Psi}{dx}(x) \right) - \left(-i\hbar \frac{d}{dx}(x\Psi(x)) \right) = i\hbar \Psi(x).$$

Donc $[\widehat{x}, \widehat{p}] = i\hbar$. On déduit de (2) et de la condition de normalisation $\|\Psi\|^2 = 1$ que $\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$.