Chapitre VIII

Formalisme et notation de Dirac
(Suite)

Mécanique Quantique
2021-2022 – Semestre 5 – JUNIA ISEN Lille

David Mele
david.mele@junia.com

VIII.5 Opérateur

A – Définition d'opérateur

Opérateur: Objet mathématique agissant sur une fonction pour donner une autre fonction:

$\hat{A}\,\Psi(x) = \Phi(x)$ ou $\hat{A}\,|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$

Exemples: $\boxed{\dfrac{d}{dx}} f(x) = f'x$

opérateur

Opérateurs différentiels	Opérateurs parité	Opérateurs multiplicatif	Opérateurs identité	
$\hat{\boldsymbol{D}}=\dfrac{d}{dx}$	$\hat{\boldsymbol{P}} f(x) = f(-x)$	$\hat{\boldsymbol{M}}=g(x)\times$	$\hat{\boldsymbol{I}} f(x) = f(x)$	Etc…

VIII.4 Opérateur

A – Définition d'opérateur

Toute l'information sur le système est contenue dans la fonction d'onde et on utilise des **opérateurs** pour extraire cette information.

Dans le formalisme de la mécanique quantique, **la mesure** (information sur une grandeur physique d'un système) est représentée par ce qu'il est convenu d'appeler une **observable.**

Second Postulat (principe de correspondance) :

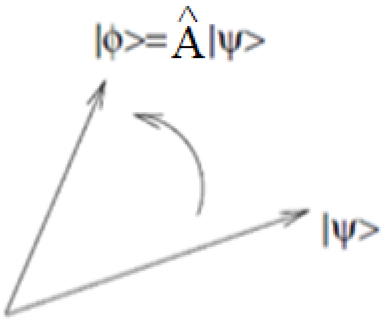
A toute grandeur physique mesurable A, on peut associer une observable Â qui est opérateur agissant dans l'espace des états.

Cet opérateur va permettre de déterminer l'ensemble des mesures possibles associées à cette observable ($\hat{H} \rightarrow$ énergie, $\hat{L} \rightarrow$ moment cinétique, $\hat{X} \rightarrow$ position, $\hat{S} \rightarrow$ spin ...)

VIII.4 Opérateur

A – Définition d'opérateur

Un opérateur est donc une transformation qui permet de passer d'une fonction d'onde. **D'un vecteur d'état ket à un autre**



De façon générale, on définit l'action d'un opérateur linéaire noté $\hat{A}$, par son action sur un ket $|\Psi\rangle$ quelconque pour donner un ket $|\Phi\rangle$ tel que:

$$\forall\, |\Psi\rangle \in \varepsilon_H \quad \Rightarrow \quad \boxed{\hat{\boldsymbol{A}}\,|\boldsymbol{\Psi}\rangle = |\boldsymbol{\Phi}\rangle} \;\in \varepsilon_H$$

$$\forall |\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle \in \varepsilon_H \quad \Rightarrow \quad \hat{A}\,(\,|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle\,) = \hat{A}\,|\Psi_1\rangle + \hat{A}\,|\Psi_2\rangle$$

$$\forall \lambda \in \mathbb{C}, \forall |\Psi\rangle \in \varepsilon_H \quad \Rightarrow \quad \hat{A}\,|\lambda\Psi\rangle = \lambda\,\hat{A}\,|\Psi\rangle$$

VIII.4 Opérateur

B – Valeurs propres et vecteurs propres

On l'a vu, certaines fonctions sont invariantes par l'application d'un opérateur, à une constante multiplicative près.

Exemple: $$\frac{d}{dx}e^{\beta x} = \underbrace{\beta}\,\underbrace{e^{\beta x}}$$

Ces fonctions particulières sont appelées **fonctions propres** de l'opérateur et le coefficient constant est appelé **valeur propres** de l'opérateur, associé à la fonction propre correspondante.

> **Les seules valeurs mesurables d'une observable sont données par les valeurs propres de son opérateur associé.**
>
> **Ces valeurs propres doivent être des réelles car ce sont des grandeurs physiques**

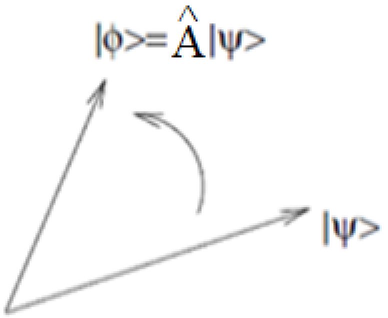
On peut néanmoins définir des opérateurs quantiques qui ne sont pas des observables et qui ont des valeurs propres complexes.

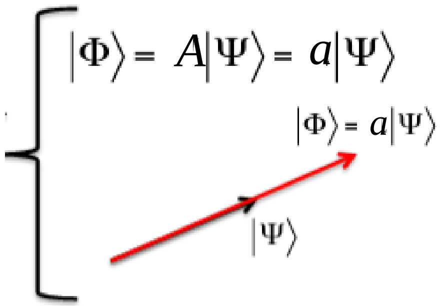
VIII.4 Opérateur

B – Valeurs propres et vecteurs propres

Soit $|\Psi\rangle$ l'état d'un système au moment où l'on effectue une mesure de la grandeur A.

- Quelque $|\Psi\rangle$, les seuls résultats possibles de cette mesure sont les valeurs propres a_n de l'observable A





- Pour des valeurs propres non dégénérés, la probabilité de trouver le résultat a_n lors d'une mesure de A est donnée par :

$$\mathrm{P}(a_n) = |C_n|^2$$

avec l'état initialement superposé $|\Psi\rangle = \sum \langle \Psi_n|\Psi\rangle\, |\Psi_n\rangle = \sum C_n |\Psi_n\rangle$ dans la base $|\Psi_n\rangle$

VIII.4 Opérateur

C – Opérateur adjoint

Du fait de l'associativité du produit matriciel, le produit scalaire d'un ket $|\varphi\rangle$ et d'un autre ket associé à un opérateur $\hat{\boldsymbol{A}}|\psi\rangle$ se note:

$$\langle\varphi|\,.\,\hat{\mathbf{A}}\,|\psi\rangle = \langle\varphi|\,\hat{\mathbf{A}}\,.\,|\psi\rangle = \langle\varphi|\,\hat{\mathbf{A}}\,|\psi\rangle$$

On définit l'opérateur adjoint $\hat{A}^{+}$ de $\hat{A}$ tel que:

$$\forall|\varphi\rangle,|\psi\rangle \in \varepsilon_H \qquad \Rightarrow \qquad \boxed{\langle\varphi|\,\widehat{\boldsymbol{A}}\,|\psi\rangle^{*} = \langle\psi|\,\widehat{\boldsymbol{A}^{*}}\,|\varphi\rangle}$$

On trouve aussi la notation $\widehat{\mathbf{A}^{\dagger}}$ ou $\widehat{\mathbf{A}^{+}}$

Cette opérateur adjoint est la matrice transconjuguée de A: $\widehat{\boldsymbol{A}^{*}} = \overline{\widehat{\boldsymbol{A}^{T}}}$
(matrice transposée de la matrice conjuguée)

Rappelons que la transposition d'un produit de matrice reviens à inverser leur ordre et à remplacer les éléments de chaque matrice par leur complexes conjugués

VIII.4 Opérateur

D – Opérateur hermitien

En mécanique quantique, une observable est forcement décrit par un **opérateur linéaire auto-adjoint** ou hermitien car il garantit d'obtenir des valeurs propres (mesure possible d'une expérience) qui sont réelles.

Une théorie quantique dans laquelle l'opérateur n'est pas hermitien peut conduire à des résultats non physiques (énergies complexes par exemple).

On définit l'hermiticité d'un opérateur $\hat{A}$ par la relation :

$$\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \varepsilon_H \quad \Rightarrow \quad \boxed{\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \quad \text{ou} \quad \hat{A} = \widehat{A^*}}$$

Exemple:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & i & -5i \\ -i & -2 & 5 \\ 5i & 5 & 10 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{matrice conjuguée}} \overline{A} = \begin{pmatrix} 3 & -i & 5i \\ i & -2 & 5 \\ -5i & 5 & 10 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{matrice transposée}} (\overline{A})^T = \begin{pmatrix} 3 & i & -5i \\ -i & -2 & 5 \\ 5i & 5 & 10 \end{pmatrix} = A$$

VIII.4 Opérateur

E – Matrice hermitique

Si un opérateur linéaire $\hat{A}$ **est hermitique** alors peut donc être totalement caractériser par une matrice qui n'est pas modifiée par transposition: $\boldsymbol{\hat{A} = \widehat{A^*} = \overline{\widehat{A^T}}}$

La matrice hermitique associée cet opérateur hermitique doit donc posséder les propriétés suivantes:

- Elle est carré
- Les éléments de sa diagonale principale sont des réels
- Et les éléments symétriques par rapport à cette diagonale sont des imaginaires conjugués

Exemple: opérateurs position et impulsion

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad \hat{p} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ i\sqrt{1} & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

VIII.4 Opérateur

F – Diagonalisation

Théorème spectral

Un opérateur est diagonalisable et on peut former une base hilbertienne avec ses vecteurs propres

On peut diagonaliser une matrice d'un opérateur hermitien $\hat{H}$ de sorte que $\hat{A}$ vérife: $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$

$\hat{H}$ se diagonalise en $\hat{A}$ tel que:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & a_2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & a_3 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & a_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}}_{\hat{A}} \underbrace{\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \end{pmatrix}}_{|\psi_n\rangle}$$

Valeurs propres a_n
Spectre de A

Vecteurs propres

Voir VII – 1 - E

VIII.4 Opérateur

F – Valeur moyenne d'une mesure

La mesure d'une observable dans un état propre $|\psi_n\rangle$ est égale à a_n.

Soit $|\Psi\rangle$ un état quelconque du système, construit sur la base des états propres

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} C_i \, |\psi_i\rangle$$ avec ${C_i}^2$ la probabilité de mesurer l'état $|\psi_i\rangle$

Si on prépare un grand nombre de systèmes identiques tous dans l'état $|\Psi\rangle$ et qu'on mesure A sur chacun des N systèmes, la **moyenne $\langle a\rangle$ des résultats a_n possibles** vaut:

$$\langle a\rangle = \int \Psi^*(x)\,[\hat{A}\Psi(x)]dx \quad \text{ou} \quad \langle a\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\hat{A}\,\psi_n\rangle$$

Base continue

Base discrète

$$\Rightarrow \quad \boxed{\langle a\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle}$$

Voir TD7

VIII.4 Opérateur

G – Ecart type et incertitude

La mesure d'une observable dans un état propre $|\psi_n\rangle$ est égale à a_n.
Si je répète un grand nombre de fois la mesure, je peux calculer une moyenne à partir des valeurs propres.

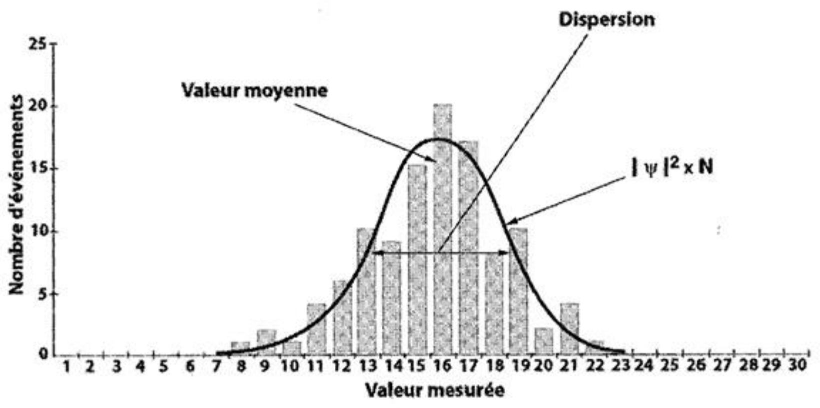
Cette **moyenne $\langle a\rangle$ de l'observable $\hat{\boldsymbol{A}}$** est donc une variable aléatoire et peut donc être donnée avec un certain **écart type $\boldsymbol{\sigma}(\hat{\boldsymbol{A}})$** ou $\boldsymbol{\Delta a}$. Le carré de l'écart quadratique moyen, qui mesure la dispersion des mesures autour de la valeur moyenne est donnée

$$(\Delta \boldsymbol{a})^2 = \langle a - \langle a\rangle\rangle^2 = \langle a^2\rangle - \langle a\rangle^2$$

$$\boxed{\Delta \boldsymbol{a} = \sqrt{\langle a^2\rangle - \langle a\rangle^2}}$$

Ces incertitudes n'ont rien à voir avec une quelconque imprécision des mesures.

Elles sont intrinsèquement quantiques!



Exemple simple d'histogramme de la distribution des résultats de mesure de position de particules préparées dans le même état ψ.

Voir TD7

VIII.5 Opérateurs importants

A – Opérateur quantité de mouvement : $\widehat{\boldsymbol{P}}$

Nous avons déjà montré que la quantité de mouvement d'une particule p était liée au vecteur d'onde k de l'onde associée par:

$$p = \hbar \mathrm{k}$$

Cette onde est donc associée à une quantité de mouvement donnée et c'est donc une fonction propre de l'opérateur quantité de mouvement et on doit avoir:

$$\hat{P} e^{ikx} = \hat{P} e^{ipx/\hbar} = p e^{ipx/\hbar}$$

L'expression de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{P}}$ est donc:

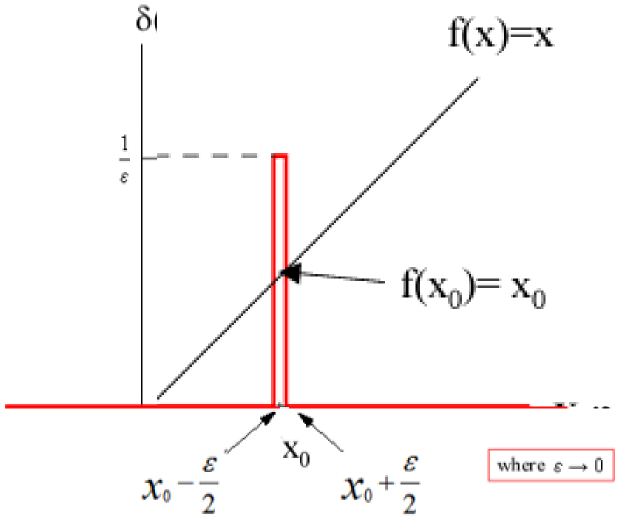
$$\boxed{\widehat{\boldsymbol{P}} = -\boldsymbol{i}\hbar \frac{\boldsymbol{d}}{\boldsymbol{dx}}}$$

En effet: $-i\hbar \frac{d}{dx}\left(e^{\frac{ipx}{\hbar}}\right) = -i\hbar \left(\frac{ip}{\hbar}\right) e^{\frac{ipx}{\hbar}} = p e^{\frac{ipx}{\hbar}}$

VIII.5 Opérateurs importants

B – Opérateur position: $\widehat{\boldsymbol{X}}$

Les fonctions propres de cet opérateur décrivent une particule dont la position est parfaitement connue. Elle doit donc être associée à une **fonction « delta » de Dirac**:



$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})\delta(x - x_0) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x_0})\delta(x - x_0)$$

$$\widehat{\boldsymbol{X}}\delta(x - x_0) = \boldsymbol{x_0}\delta(x - x_0)$$

L'expression de l'opérateur $\widehat{\boldsymbol{X}}$ est donc:

$$\widehat{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{x} \times$$

VIII.5 Opérateurs importants

C – Opérateur énergie (Hamiltonien) : $\hat{H}$

L'Hamiltonien est un opérateur très important. Il permet de déterminer l'énergie totale d'un système. Il est composé de la somme de plusieurs termes correspondant chacun à une énergie d'origine différente (énergie cinétique, énergie potentielle, énergie de rotation, énergie électrostatique…)

D – Opérateur énergie cinétique : $\hat{T}$

L'opérateur énergie cinétique $\hat{T}$ d'une particule se déplaçant le long de la direction x peut se déduire de la forme classique de l'énergie cinétique:

$$E_{cin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$ où m est la masse de la particule

$$\boxed{\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}}$$

VIII.5 Opérateurs importants

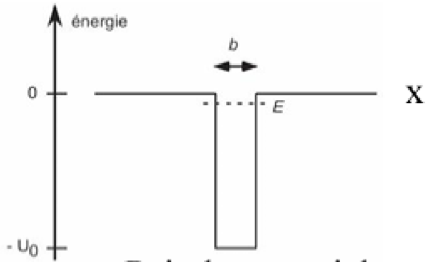
E – Opérateur énergie potentielle : $\hat{V}$

L'énergie potentielle est liée aux forces agissant sur le système par la relation

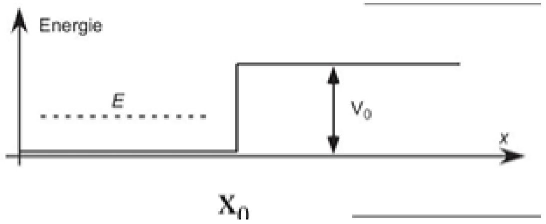
$$\vec{F} = -\overrightarrow{grad}\, V = -\frac{\partial}{\partial x}\vec{i} - \frac{\partial}{\partial x}\vec{j} - \frac{\partial}{\partial x}\vec{k}$$

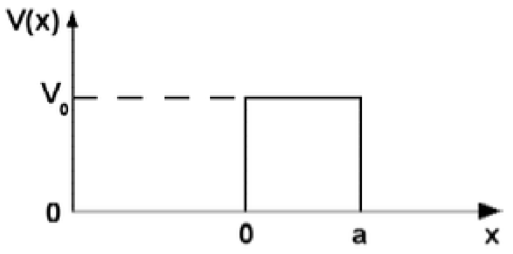
$\hat{V}$ est généralement une fonction des coordonnées géométriques du système et ne comporte pas d'opérateurs différentiels. C'est un **opérateur multiplicatif**.

Contrairement à la mécanique classique où la force joue un rôle central, en mécanique quantique on utilise principalement la notion de potentiel

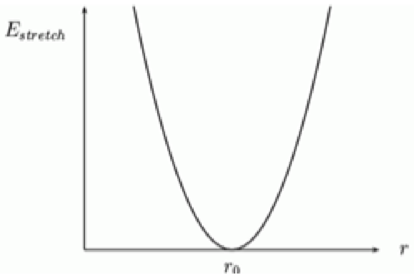


Puit de potentiel





Barrière de potentiel



Potentiel harmonique $\hat{V} = \frac{1}{2}k\,(r - r_0)^2$

Potentiel du ressort, très important dans de nombreux modèles physiques (liaison chimique).

Voir TD7

Autres exemple d'opérateurs quantiques

Operator (common name/s)	General definition	SI unit
Position	$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$	m
Momentum	General $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$	J s m^{-1} = N s
	Electromagnetic field (uses kinetic momentum; **A**, vector potential) $\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{P}} - q\mathbf{A} = -i\hbar\nabla - q\mathbf{A}$	J s m^{-1} = N s
Kinetic energy	$\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)\cdot(-i\hbar\nabla) = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2$	J
	Electromagnetic field (**A**, vector potential) $\hat{T} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})\cdot(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}) = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})^2$	J
	Rotation $\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{J}}\cdot\hat{\mathbf{J}}}{2I}$ [citation needed]	J
Potential energy	$\hat{V} = V(\mathbf{r}, t) = V$	J

Operator (common name/s)	General definition	SI unit
Total energy	Time-dependent potential: $\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ Time-independent: $\hat{E} = E$	J
Hamiltonian	$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{1}{2m}\hat{\mathbf{p}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + V = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V$	J
Angular momentum operator	$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times -i\hbar\nabla$	J s = N s m
Spin angular momentum	$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ where $\boldsymbol{\sigma}$ is the vector whose components are the Pauli matrices.	J s = N s m
Total angular momentum	$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$	J s = N s m
Transition dipole moment (electric)	$\hat{\mathbf{d}} = q\hat{\mathbf{r}}$	C m

VIII.5 Système à deux opérateurs

A – Addition d'opérateurs

Une somme d'opérateur est un opérateur

Soit $\hat{A}$ et $\hat{B}$

$$\hat{A} = \frac{d}{dx} \qquad \text{et} \qquad \hat{B} = (x-2)\times$$

$$\hat{O} = \hat{A} + \hat{B} = \frac{d}{dx} + (x-2)\times$$

$$\hat{O}f(x) = \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) = \frac{d}{dx}f(x) + (x-2)f(x)$$

Et cette somme d'opérateurs est commutative

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f(x) = \frac{d}{dx}f(x) + (x-2)f(x)$$

$$= (x-2)f(x) + \frac{d}{dx}f(x)$$

$$= \left(\hat{B} + \hat{A}\right) f(x)$$

VIII.5 Système à deux opérateurs

B – Multiplication d'opérateurs

Le produit de deux opérateurs est un opérateur

Lorsqu'on applique un produit d'opérateur à une fonction (ou ket), **on applique dans l'ordre, chaque opérateur en partant de celui le plus à droite** à la fonction

Soit $\hat{A}$ et $\hat{B}$ et $f(x) = 3x$

$$\hat{A} = \alpha \frac{d}{dx} \quad \text{et} \quad \hat{B} = (x-2)\times$$

$$\hat{A}\hat{B} = \alpha \frac{d}{dx}(x-2)\times$$

$$\hat{A}\hat{B}f(x) = \alpha \frac{d}{dx}[(x-2)3x] = \alpha \frac{d}{dx}(3x^2 - 6x)$$

$$\hat{A}\hat{B}f(x) = 6\alpha x - 6\alpha$$

$$\hat{B}\hat{A} = (x-2)\times \alpha \frac{d}{dx}$$

$$\hat{B}\hat{A}f(x) = (x-2)\alpha \frac{d}{dx}[3x] = (x-2)\times 3\alpha$$

$$\hat{B}\hat{A}f(x) = 3\alpha x - 6\alpha$$

Différent!

Le produit de deux opérateurs n'est pas toujours commutatif!

VIII.5 Système à deux opérateurs

C – Commutateur

Cette question de commutativité du produit de deux opérateurs est si importante que l'on a défini un opérateur spécial appelé le commutateur de deux opérateurs $\widehat{\boldsymbol{A}}$ et $\widehat{\boldsymbol{B}}$:

$$\boxed{[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}$$

Dans l'exemple précédent:

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f(x) = \hat{A}\hat{B}f(x) - \hat{B}\hat{A}f(x)$$

$$= \alpha\frac{d}{dx}[(x-2)f(x)] - (x-2)\alpha\frac{d}{dx}f(x)$$

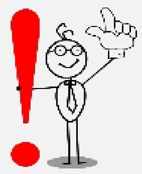
$$= \alpha\big(f(x) + (x-2)f'(x)\big) - (x-2)\alpha f'(x)$$

$$= \alpha f(x)$$

Ici $[\hat{A},\hat{B}] = \alpha$

Si le commutateur est nul, on dira que $\widehat{\boldsymbol{A}}$ et $\widehat{\boldsymbol{B}}$ commutent

- Quand deux matrices Hermitiennes commutent, il existe une base de vecteurs propres commune.
- Ce qui est équivalent à dire qu'il existe une base dans laquelle ces deux matrices s'écrivent sous forme diagonale.



Lorsqu'un produit d'opérateurs apparait dans une équation, ne jamais permuter leur position s'ils ne commutent pas !!!

VIII.5 Système à deux opérateurs

D – Principe d'indétermination d'Heisenberg (encore)

Si **deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ne commutent pas**, il est impossible de trouver un état physique pour lequel une mesure de $\hat{A}$ et une mesure de $\hat{B}$ donnerait des valeurs précises.

Définissons l'opérateur hermitien $\hat{C}$ par la relation

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\,\hat{C}$$

La produit et la somme d'opérateurs est un opérateur (complexe ou réel)

Le théorème d'Heisenberg est l'assertion que:

$$\boxed{\Delta\hat{A}.\Delta\hat{B} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\hat{C}\rangle\right|}$$

Le produit des incertitudes dans la mesures de deux observables est toujours plus grand ou égal à la moitié de la valeur absolue de la moyenne du commutateur de ces deux observables !

Exemple:

$\hat{X} = x$ (opérateur position sur l'axe Ox)

$\hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ (opérateur impulsion sur Ox)

Le commutateur appliqué à la fonction d'onde est:

$$[\hat{X}, \hat{P}]\varphi(x) = i\hbar\varphi(x)$$

La relation d'indétermination donne:

$$\Delta\hat{X}.\Delta\hat{P} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Voir TD7

VIII.5 Système à deux opérateurs

D – Principe d'indétermination d'Heisenberg (encore)

Lorsque $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ les variables sont dites indépendantes

$[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ les variables sont dites conjuguées

Pour résumer:

Si vous mesurez la position puis l'impulsion (qui sont deux variables conjuguées) vous obtiendrez un résultat diffèrent que si vous mesuriez l'impulsion puis la position d'un particule.

L'ordre d'une chaine de mesure a donc son importance!

Exemple:

$\hat{X} = x$ (opérateur position sur l'axe Ox)

$\hat{P} = -\boldsymbol{i}\hbar\frac{\boldsymbol{d}}{\boldsymbol{dx}}$ (opérateur impulsion sur Ox)

➡ Le commutateur appliqué à la fonction d'onde est:

$$[\hat{X}, \hat{P}]\varphi(x) = i\hbar\varphi(x)$$

➡ La relation d'indétermination donne:

$$\Delta\hat{X}.\Delta\hat{P} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Voir TD7

VIII.5 Système à deux opérateurs

D – Principe d'indétermination d'Heisenberg (encore)

Le cas particulier de la relation temps-énergie.

Il existe d'autre principe d'indétermination (sur la mesure du moment angulaire par exemple) mais une relation très importante en physique concerne la durée $\boldsymbol{\Delta t}$ indispensable à la détection d'une particule $\boldsymbol{E}$ à $\boldsymbol{\Delta E}$ près qui vérifie aussi.

$$\Delta E . \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Voir TD8

Cependant, la déduction de cette inégalité énergie-temps est assez différente de celle des inégalités position-impulsion. En effet, bien que les variables énergie et temps soient des variables conjuguées et que l'hamiltonien est un opérateur associé à l'énergie, il n'existe pas d'opérateur $\hat{T}$ associé au temps en mécanique quantique (théorème de Pauli); On ne peut donc construire de commutateur avec $\hat{H}$ qui vérifierai:

$$\left[\hat{H}, \hat{T}\right] = i\hbar$$

La raison est que la mécanique quantique s'est construite en imposant que l'énergie possède une valeur minimale (le quantum d'action).

VIII.6 Evolution temporelle

A – Etat quelconque superposé

Soit mon système **dans un état quelconque superposé** $|\boldsymbol{\psi}\rangle = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{C_n} \, |\boldsymbol{\psi_n}\rangle$ construit sur les états propres $|\psi_n\rangle$ du système.

Quelle est l'évolution dans le temps de la fonction d'onde d'un système quantique?

$$|\psi(t)\rangle = \sum \boldsymbol{C_n(t)} \, |\psi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \widehat{\boldsymbol{H}}|\psi(t)\rangle$$

Equation de Schrödinger dépendante du temps

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt}\langle\psi_p|\psi(t)\rangle = \langle\psi_p|\widehat{\boldsymbol{H}}|\psi(t)\rangle$$

$$= \boldsymbol{E_p}\langle\psi_p|\psi(t)\rangle$$

Projection sur un état $|\psi_p\rangle$ correspondant à un instant $t_0 + t$

$$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} C_p(t) = \boldsymbol{E_p} C_p(t)$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{C_p(t) = C_p(t_0) e^{-iE_p(t-t_0)/\hbar}}$$

VIII.6 Evolution temporelle

B – Etats propres

$$|\boldsymbol{\psi}\rangle = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{C_n}\,|\boldsymbol{\psi_n}\rangle$$

Que se passe t'il si $|\psi(t)\rangle$ est dans un état propre $|\psi_n\rangle = |\psi_i\rangle$ de l'Hamiltonien à t=t_0 ?

$C_i = 1$ donc $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_i\rangle$ $\xrightarrow[C_p(t) = C_p(t_0)e^{-iE_p(t-t_0)/\hbar}]{\text{D'après la relation trouvé précédemment}}$ $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}|\psi_i\rangle$

$|\psi(t)\rangle$ et $|\psi(t_0)\rangle$ ne diffèrent donc que d'une phase $e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}$

Mais $\langle\psi_i|\psi(t)\rangle = e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}\langle\psi_i|\psi_i\rangle$ Alors: $|\langle\psi_i|\psi(t)\rangle|^2 = \left|e^{-iE_i(t-t_0)/\hbar}\langle\psi_i|\psi_i\rangle\right|^2$

$|\langle\psi_i|\psi(t)\rangle|^2 = 1|\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle|^2$ quelque soit t

Les états propres de A sont donc bien stationnaires

Tout système qui se trouve dans un état propre de A ne varie pas au cours du temps: état stationnaires

Du formalisme de Dirac, je retiens…

- Le formalisme de Dirac permet de construire une mécanique quantique en l’absence de toute référence à une représentation. Cette construction repose essentiellement sur le principe de superposition. Elle généralise la mécanique des matrices et la mécanique ondulatoire et permet de décrire des systèmes qui n’ont pas d’équivalent classique.

- Un état physique correspond à un ket dans un espace vectoriel complexe, l’espace des kets (premier postulat). La correspondance par dualité associe à chaque ket $|\psi\rangle$ de l’espace des kets un bra, $\langle\psi|$, de l’espace des bras.

- On définit un produit scalaire entre deux kets. Il faut connaître les propriétés de ce produit scalaire.

- Une grandeur physique correspond à une observable agissant sur les kets ou les bras (principe de correspondance). Il faut connaître les définitions de l’adjoint d’un opérateur et d’un opérateur hermitique ou auto-adjoint.

Du formalisme de Dirac, je retiens…

- L'espace des kets est sous-tendu par l'ensemble des kets propres d'une observable agissant sur le système. **Il faut savoir ce qu'est l'équation aux valeurs propres d'un opérateur (valeurs propres, kets propres).** L'ensemble de ces kets propres forment une base. Il faut connaître la définition d'une base (ensemble complet de kets linéairement indépendants). Il faut savoir ce qu'est une relation de fermeture. On distingue les bases discrètes des bases continues.

- **Des observables compatibles ont une base de kets propres en commun**.

- Deux opérateurs qui ne commutent pas sont dits incompatibles. **Il faut connaitre les relations de commutation canoniques.**

- **L'incompatibilité entre deux opérateurs est à l'origine du principe d'incertitude** (fluctuations quantiques).

- **La mécanique quantique a un caractère intrinsèquement probabiliste**. Il faut savoir calculer des moyennes et écarts quadratiques.

- Il faut savoir ce qu'est une fonction δ de Dirac et en connaître les principales propriétés.

How to participate?

WEB

1. Connect to **www.wooclap.com/LZGUXL**
2. You can participate

SMS

1. Not yet connected? Send **@LZGUXL** to **06 44 60 96 62**
2. You can participate