PHYSIQUE QUANTIQUE — CONTRÔLE DE CONNAISSANCES d'après le MOOC Introduction à la physique quantique - partie 1 de l'Institut polytechnique de Paris

A. Wayoff https://armandwayoff.github.io

2022 - 2023

TABLE DES MATIÈRES

1	Introduction par l'expérience	2
2	Mécanique analytique	3
3	Premier et deuxième postulat	4
4	Formalisme de DIRAC	5
5	Troisième postulat	6
6	Inégalité de Heisenberg	9

1 Introduction par l'expérience

QUESTIONS

- Q.1 Pourquoi le modèle planétaire ne peut-il pas expliquer la stabilité des atomes?
- Q.2 Quelle a été, historiquement, l'expérience qui a « déclenché » la naissance de la physique quantique?
- Q.3 Comment est déterminée la constante de Planck?
- Q.4 Comment a-t-on trouvé, historiquement, la valeur numérique de la constante de Planck?
- Q.5 Que vaut la constante de Planck?
- Q.6 Quelle énergie peut être échangée entre matière et rayonnement?
- Q.7 Une particule de masse m est dans un puits de potentiel unidimensionnel de hauteur infinie et de largeur a. Quelles sont les valeurs des énergies accessibles par la particule?
- **Q.8** Quelles sont les valeurs propres de l'observable hamiltonien pour un oscillateur harmonique de fréquence angulaire ω ?
- Q.9 Le spectre d'émission du corps noir est caractérisé par un maximum de l'intensité qui ...
- Q.10 Quels sont les problèmes de la formule de RAYLEIGH et JEANS?
- Q.11 Quelle est l'expression de la densité spectrale d'énergie du corps noir en accord avec l'expérience?
- Q.12 Les franges observées dans l'expérience des fentes de Young avec des électrons sont générées par ...
- Q.13 Peut on parler de longueur d'onde d'un atome?
- Q.14 Il est connu que les rayons X, quand ils interagissent avec un ensemble ordonné d'atomes, autrement dit un réseau cristallin, donnent lieu à une figure de diffraction. Un faisceau d'électrons peut-il aussi être diffracté?

RÉPONSES

- **R.1** Le modèle planétaire ne peut pas expliquer la stabilité des atomes parce que les électrons étant des particules chargées subissant une accélération, ils devraient émettrent des ondes électromagnétiques. Ainsi, ils perdraient de l'énergie jusqu'à ce que le rayon de leur orbite autour du noyau se réduise à zéro.
- R.2 Il s'agit de la mesure du spectre du rayonnement du corps noir.
- **R.3** C'est une constante fondamentale.
- R.4 La valeur numérique de la constante de Planck a historiquement été trouvée par l'ajustement entre la courbe théorique et la courbe obtenue expérimentalement lors d'une mesure du spectre du rayonnement du corps noir.
- **R.5** $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$
- **R.6** Cette énergie est égale à un nombre entier de quanta d'énergie $\varepsilon = \hbar \omega$. L'échange d'énergie est discret.
- **R.7** $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$, avec $n \in \mathbb{N}^*$
- **R.8** $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$
- R.9 ...se décale vers les hautes fréquences lorsque l'on augmente la température.
- R.10 L'énergie totale émise par le corps noir serait infinie.
 - Cette formule n'est pas en accord avec les expériences.
 - L'énergie émise divergerait aux hautes fréquences.
- **R.11** $u(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} \frac{h\nu^3}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) 1}$
- R.12 ...l'interférence d'un électron avec lui-même, il s'agit d'un phénomène à une seule particule.
- **R.13** Oui, sa longueur d'onde est donnée par $\lambda = h/p$, où p est l'impulsion de l'atome.
- R.14 Oui, en raison de la dualité onde-particule.

2 MÉCANIQUE ANALYTIQUE

QUESTIONS

- Q.1 Sous quelle(s) condition(s) le lagrangien d'un système est-il égal à son énergie potentielle soustraite de son énergie cinétique?
- Q.2 Sous quelle(s) condition(s) le principe de moindre action implique-t-il les équations de LAGRANGE?
- Q.3 Une vitesse généralisée est-elle toujours homogène à une longueur divisée par un temps?
- Q.4 Une impulsion est-elle une quantité physique de même nature qu'une quantité de mouvement?
- Q.5 Par quel scientifique les équations de Hamilton ont-elles été découvertes?
- **Q.6** Quelle est l'expression du crochet $\{f, gh\}$?
- ${\sf Q.7}$ Le hamiltonien d'une particule libre soumise à une énergie potentielle indépendante du temps est égal à \dots
- **Q.8** Quelle est la nature du système décrit par le hamiltonien $H(q,p) = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$?
- **Q.9** Quelle est la nature du système dont le lagrangien a pour expression $L(q, \dot{q}) = \dot{q}^2 q$?

RÉPONSES

- **R.1** Le lagrangien d'un système est égal à son énergie potentielle soustraite de son énergie cinétique si toutes les forces appliquées à ce système sont **conservatives**.
- R.2 Le principe de moindre actions implique les équations de LAGRANGE si toutes les forces appliquées à ce système dérivent d'une énergie potentielle indépendante des vitesses.
- R.3 Non, pas toujours. On peut penser à une vitesse angulaire par exemple.
- R.4 Dans le cas d'une particule soumise à des forces ne dépendant pas de sa vitesse, la réponse est oui.
- R.5 Contrairement à leur nom, les équations de Hamilton ont été introduites par Joseph-Louis Lagrange.
- **R.6** $\{f,gh\} = g\{f,h\} + h\{f,g\}$. Cette expression découle immédiatement de la dérivée d'un produit.
- R.7 ...la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle de la particule.
- **R.8** Le hamiltonien H est celui d'une particule dans un potentiel harmonique. Un potentiel harmonique a un comportement en x^2 , d'où le terme q^2 .
- R.9 Ce lagrangien est celui d'un système en mouvement uniformément accéléré.

3 Premier et deuxième postulat

QUESTIONS

- Q.1 À quoi correspond le module carré de la fonction d'onde?
- Q.2 À est égale l'intégrale du module carré de la fonction sur tout l'espace?
- Q.3 Sur quel corps de nombres une fonction d'onde est-elle définie?
- Q.4 Un système est dans un état décrit par la combinaison linéaire de deux fonctions d'onde orthogonales $\psi(x,t) = \frac{i}{\sqrt{2}} \psi_1(x,t) + c \psi_2(x,t)$. Quelle est la valeur de la constante c?
- Q.5 Un système est dans un état décrit par une fonction d'onde qui est combinaison linéaire de deux fonctions d'onde orthogonales $\psi(x,t) = \frac{i}{\sqrt{2}}\psi_1(x,t) + c\psi_2(x,t)$. Quelle est la valeur de l'intégrale $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)\psi(x,t) dx$?
- Q.6 Soit l'équation de SCHRÖDINGER et le hamiltonien \widehat{H} indépendant du temps. Qu'est-ce qu'état stationnaire?
- **Q.7** Que vaut le commutateur $\left[x^2, \frac{\partial}{\partial x}\right]$?
- Q.8 Un électron, dont le hamiltonien ne dépend pas du temps, est dans l'état quantique décrit par la fonction d'onde

$$\psi(x,t) = c_0 \varphi_0(x) e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} + c_1 \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}$$

où $E_0 \neq E_1$ et $\varphi_0(x)$ et $\varphi_1(x)$ sont les fonctions propres du hamiltonien pour les valeurs propres E_0 et E_1 , respectivement. Est-ce que la densité de probabilité de présence dans l'espace de l'électron est stationnaire?

RÉPONSES

- R.1 Le module carré de la fonction d'onde correspond à la densité de probabilité de présence dans l'espace.
- R.2 Elle est égale à 1. Afin d'être cohérent avec l'interprétation probabiliste, la probabilité totale de trouver la particule dans l'espace doit valoir 1.
- R.3 Une fonction d'onde est définie sur le corps des nombres complexes.
- R.4 $c = \frac{e^{i\alpha}}{\sqrt{2}}$ avec $\alpha \in \mathbb{R}$. L'intégrale sur tout l'espace du module carré de la fonction d'onde $\psi(x,t)$ doit

valoir 1. L'intégrale sur tout l'espace des modules carré des fonctions d'onde $\psi_1(x,t)$ et $\psi_2(x,t)$ vaut 1. De plus ces deux fonctions d'onde sont orthogonales, donc $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^{\star}(x,t)\psi_2(x,t) dx = 0$. Ainsi, c doit être telle que $|c|^2 + 1/2 = 1$, d'où $c = e^{i\alpha}/\sqrt{2}$, le facteur de phase étant ici arbitraire.

La constante c peut aussi être déterminée en utilisant le fait que la somme des modules carrés des coefficients de la décomposition doit être égale à 1.

R.5 $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t)\psi(x,t) dx = 1$. Du moment où l'on spécifie qu'il s'agit d'une fonction d'onde, le module

carré est interprété comme densité de probabilité de présence dans l'espace, donc l'intégrale sur tout l'espace du module carré vaut forcément 1.

- **R.6** Un état stationnaire est une fonction propre $de \hat{H}$. Un état stationnaire est toujours une fonction propre $de \hat{H}$ si \hat{H} ne dépend pas du temps.
- **R.7** $\left[x^2, \frac{\partial}{\partial x}\right] = -2x$. Nous avons montré que le commutateur entre $\frac{\partial}{\partial x}$ et f(x) vaut $\frac{\partial f(x)}{\partial x}$, ce qui implique

que le commutateur entre f(x) et $\frac{\partial}{\partial x}$ vaut $-\frac{\partial f(x)}{\partial x}$. Dans ce cas, $f(x) = x^2$, d'où le résultat.

R.8 Non. La densité de probabilité de présence dans l'espace de l'électron est donnée par le module carré de la fonction d'onde, c'est-à-dire par $|\psi(x,t)|^2$. Dans le calcul de ce module carré, il apparaît un terme dépendant de t, car on considère deux niveaux d'énergie distinctes, E_0 et E_1 , donc la densité de probabilité de présence dans l'espace de l'électron est modifiée au cours du temps. Pour que la densité de probabilité de présence soit stationnaire, il faudrait que E_0 soit égale à E_1 .

4

4 Formalisme de Dirac

QUESTIONS

- Q.1 Qu'est-ce qu'un espace de HILBERT?
- **Q.2** Quelles sont les propriétes de linéarité du produit sclaire $\langle \cdot | \cdot \rangle$?
- **Q.3** Quelle est l'expression de la norme d'un vecteur d'état $|\psi\rangle$?
- **Q.4** On considère une base discrète de dimension N et deux kets $|\psi\rangle = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ et $|\varphi\rangle = (\beta_1, \dots, \beta_N)$. Comment écrit-on leur produit scalaire $\langle\psi|\varphi\rangle$?
- **Q.5** On considère une base continue de dimension infinie, et deux kets $|\psi\rangle = \psi(x)$ et $|\varphi\rangle = \varphi(x)$. Comment écrit-on leur produit scalaire $\langle \psi | \varphi \rangle$?
- **Q.6** Étant donné un nombre complexe β , quel est le conjugué hermitique de $\beta \widehat{A}\widehat{B}^{+}\widehat{C}^{+}|\varphi\rangle\langle\psi|$?
- Q.7 À quel corps de nombres appartient le spectre d'un opérateur autoadjoint?
- Q.8 L'état d'un système quantique est définit par le ket

$$|\psi\rangle = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}}}{\sqrt{4}} |\alpha_1\rangle + \frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}}}{\sqrt{4}} |\alpha_2\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{4}} |\alpha_3\rangle + c |\alpha_4\rangle.$$

Ici, les kets $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, $|\alpha_3\rangle$ et $|\alpha_4\rangle$ sont des kets propres normés de l'observable \widehat{A} correspondant à différentes valeurs propres. Combien vaut la constante c?

RÉPONSES

- R.1 Un espace de HILBERT est un espace vectoriel muni d'un produit scalaire et qui est complet pour la norme associée.
- R.2 Ce produit scalaire est linéaire à droite et antilinéaire à gauche.

$$R.3 \quad |||\psi\rangle|| = \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$$

R.4
$$\langle \psi | \varphi \rangle = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i^{\star} \beta_i$$

R.5
$$\sqrt{\langle \psi | \varphi \rangle} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x) \varphi(x) \, \mathrm{d}x$$

R.6
$$\beta^{\star} |\psi\rangle \langle \varphi | \widehat{C} \widehat{B} \widehat{A}^{+}$$

- R.7 Les valeurs propres d'un opérateur autoadjoint sont réelles.
- R.8 $c = \frac{e^{\lambda i}}{\sqrt{4}}$, avec $\lambda \in \mathbb{R}$. On sait que les kets propres sont normés. De plus, on sait aussi que les kets propres correspondants à des valeurs propres différentes sont orthogonaux. Donc une base formée par les kets propres $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, $|\alpha_3\rangle$ et $|\alpha_4\rangle$ est orthonormée. En sachant que la norme de $|\psi\rangle$ doit être unitaire, donc en imposant $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, on trouve le résultat.

5 Troisième postulat

QUESTIONS

Q.1 Le système est dans un état décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t)$. Afin de calculer la valeur moyenne de l'opérateur implusion

$$\widehat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

quelle expression doit-on utiliser?

- Q.2 Que vaut le commutateur entre l'opérateur position selon x et l'opérateur implusion selon x?
- **Q.3** Que vaut le commutateur $\left[\widehat{x}, \widehat{H}\right]$?
- **Q.4** Que vaut le commutateur $[\widehat{x}, \widehat{p}_y] + [\widehat{y}, \widehat{z}]$?
- **Q.5** Quels sont les résultats possibles pour la mesure d'une observable quelconque \widehat{A} ?
- Q.6 Considérons l'opérateur impulsion $\widehat{p}_x = -\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Le système est dans un état décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t) = \varphi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_1t}{\hbar}}$, où le fonction $\varphi(x)$ est à valeurs réelles, et E_1 est une valeur propre de l'observable hamiltonien. Quelle est la valeur moyenne de l'implusion $\langle \widehat{p}_x \rangle$?
- **Q.7** Une particule est dans un état propre du hamiltonien. En utilisant $[\widehat{x},\widehat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\widehat{p}_x$, calculer $\langle \widehat{p}_x \rangle$.
- **Q.8** L'état quantique d'une particule à une dimension est décrit par la fonction d'onde suivante $\psi(x) = C \exp\left[\frac{\mathrm{i} p_0 x}{\hbar} \frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right]$, où les constantes x_0 , a et p_0 sont réelles et supposées connues. On rappelle que $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-x^2/a^2} \, \mathrm{d}x = \sqrt{\pi} a$. Quelle est la valeur moyenne de l'opérateur implusion \widehat{p}_x ?
- Q.9 Le système est dans un état décrit par la fonction d'onde $\psi(x,t)$. Quelle est l'expression de la valeur moyenne du carré de l'observable impulsion?
- Q.10 La fonction d'onde d'une particule à l'instant t=0 est une combinaison linéaire des fonctions propres de l'observable hamiltonien $\varphi_1(x)$ et $\varphi_2(x)$ correspondant aux valeurs propres E_1 et E_2 respectivement : $\psi(x,t=0)=a_1\varphi_1(x)+a_2\varphi_2(x)$, où a_1 et a_2 sont des constantes. L'opérateur hamiltonien de la particule ne dépend pas explicitement du temps. Comment s'écrit la fonction d'onde $\psi(x,t)$ à tout instant ultérieur $t\geqslant 0$?
- Q.11 Un électron est dans un état quantique décrit par la fonction d'onde

$$\psi(x,t) = c_0 \varphi_0(x) e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} + c_1 \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}},$$

où $\varphi_0(x)$ et $\varphi_1(x)$ sont les états propres de l'observable hamiltonien correspondants aux valeurs propres E_0 et E_1 , respectivement, et c_0 et c_1 sont des constantes. L'observable hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps. Est-ce que la probabilité de mesurer la valeur de l'énergie E_1 dépend du temps?

Q.12 Supposons que l'observable hamiltonien possède quatre valeurs propres non dégénérées E_1 , E_2 , E_3 et E_4 . On indique par $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$, $\varphi_3(x)$ et $\varphi_4(x)$ les fonctions propres correspondantes. Le système est dans un état qui est décrit par la fonction d'onde

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_3(x) e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}}.$$

Quels sont les résultats possibles d'une mesure de l'énergie dans un tel état?

Q.13 Supposons que l'observable hamiltonien possède quatre valeurs propres non dégénérées E_1 , E_2 , E_3 et E_4 . On indique par $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$, $\varphi_3(x)$ et $\varphi_4(x)$ les fonctions propres correspondantes. Le système est dans un état qui est décrit par la fonction d'onde

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_3(x) e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}}.$$

Quelle est la probabilité de mesurer la valeur E_3 lors d'une mesure de l'énergie du système?

Q.14 Supposons que l'observable hamiltonien possède quatre valeurs propres non dégénérées E_1 , E_2 , E_3 et E_4 . On indique par $\varphi_1(x)$, $\varphi_2(x)$, $\varphi_3(x)$ et $\varphi_4(x)$ les fonctions propres correspondantes. Le système est dans un état qui est décrit par la fonction d'onde

6

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3}} \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + \sqrt{\frac{2}{3}} \varphi_3(x) e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}}.$$

Est-ce que la valeur moyenne d'une mesure de l'énergie du système dépend tu temps?

RÉPONSES

R.1
$$\langle p_x \rangle = -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \,\mathrm{d}x$$
. La valeur moyenne est définie par le produit scalaire $\langle p_x \rangle = -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t) \,\mathrm{d}x$

 $\langle \psi | \widehat{p}_x | \psi \rangle$. En utilisant la définition du produit scalaire, il faut donc calculer $\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) (\widehat{p}_x) \psi(x,t) dx$ ce qui donne le résultat.

R.2
$$[\widehat{x},\widehat{p}_x] = i\hbar$$

R.3
$$\left[\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\widehat{p}_x\right]$$

$$\begin{split} \left[\widehat{x},\widehat{H}\right] &= \left[\widehat{x},\frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + \widehat{V}\right] = \left[\widehat{x},\frac{\widehat{p}_x^2}{2m}\right] + \underbrace{\left[\widehat{x},\widehat{V}\right]}_{=0} = \frac{1}{2m} \left(\widehat{x}\widehat{p}_x^2 - \widehat{p}_x^2\widehat{x}\right) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\widehat{x}\widehat{p}_x^2 - \widehat{p}_x^2\widehat{x} + \widehat{p}_x\widehat{x}\widehat{p}_x - \widehat{p}_x\widehat{x}\widehat{p}_x\right) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\left[\widehat{x},\widehat{p}_x\right]\widehat{p}_x + \widehat{p}_x\left[\widehat{x},\widehat{p}_x\right]\right) = \frac{1}{2m} \left(\mathrm{i}\hbar\widehat{p}_x + \mathrm{i}\hbar\widehat{p}_x\right) \\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\widehat{p}_x \end{split}$$

- **R.4** $[\widehat{x},\widehat{p}_y]+[\widehat{y},\widehat{z}]=0$. En effet, ces commutateurs concernent des opérateurs agissant sur des degrés de libertés différents. Ils valent donc tous les deux 0.
- **R.5** Les mesures possibles sont uniquement les valeurs λ_i qui satisfont l'équation $\widehat{A} |\psi_i\rangle = \lambda_i |\psi_i\rangle$. Les seuls résultats possibles pour la mesure d'une observable sont les valeurs propres de celle-ci.
- **R.6** $\langle \widehat{p}_x \rangle = 0$. La valeur moyenne est définie par le produit scalaire $\langle p_x \rangle = \langle \psi | \widehat{p}_x | \psi \rangle$. En utilisant la définition du produit scalaire, il faut donc calculer

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t)(\widehat{p}_x)\psi(x,t) \, \mathrm{d}x$$
$$= -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x,t) \, \mathrm{d}x$$
$$= -\mathrm{i}\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x,t) \, \mathrm{d}x$$

puisque la fonction $\varphi(x)$ est à valeurs réelles. On peut résoudre l'intégrale qui donne $\langle p_x \rangle = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2} \left[\varphi^2(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ où pour effectuer le dernier passage nous rappelons que la fonction φ^2 doit tendre vers 0 à l'infini afin que le module carré de la fonction d'onde soit sommable.

R.7 $\langle \widehat{p}_x \rangle = 0$. Soit $|\psi_E\rangle$ un état propre.

$$\begin{split} \langle \widehat{p}_x \rangle &= \langle \psi_E | \widehat{p}_x | \psi_E \rangle \\ &= -\frac{\mathrm{i} m}{\hbar} \langle \psi_E | \left[\widehat{x}, \widehat{H} \right] | \psi_E \rangle \\ &= -\frac{\mathrm{i} m}{\hbar} \left(\langle \psi_E | \widehat{x} \underbrace{\widehat{H} | \psi_E \rangle}_{=E | \psi_E \rangle} - \underbrace{\langle \psi_E | \widehat{H}}_{=\langle \psi_E | E} \widehat{x} | \psi_E \rangle \right) \\ &= -\frac{\mathrm{i} m}{\hbar} E \left(\langle \psi_E | \widehat{x} | \psi_E \rangle - \langle \psi_E | \widehat{x} | \psi_E \rangle \right) \\ \langle \widehat{p}_x \rangle &= 0. \end{split}$$

R.8 $\langle \widehat{p}_x \rangle = p_0$. La valeur moyenne est définie par le produit scalaire $\langle p_x \rangle = \langle \psi | \widehat{p}_x | \psi \rangle$. En utilisant la définition du produit scalaire, il faut donc calculer

7

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t) \widehat{p}_x \psi(x,t) dx.$$

- $\mathsf{R.9} \boxed{\langle p_x^2 \rangle = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^\star(x,t) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) \, \mathrm{d}x} \, . \, \text{La valeur moyenne du carré de l'opérateur est définie par le produit scalaire } \langle p_x^2 \rangle = \langle \psi | \hat{p}_x^2 | \psi \rangle .$
- **R.10** $\psi(x,t) = a_1 \varphi_1(x) e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + a_2 \varphi_2(x) e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}$
- **R.11** Non. La probabilité de mesurer la valeur de l'énergie E_1 est donnée par la probabilité de projeter l'état du système sur l'état propre $\varphi_1(x)$ lors d'une mesure. Cette probabilité est donnée par le module carré du coefficient de décomposition linéaire sur l'état propre $\varphi_1(x)$, qui est ici $|c_1|^2$. Or, ce coefficient ne dépend pas du temps, donc la probabilité de mesurer la valeur de l'énergie E_1 de dépend pas du temps non plus.
- **R.12** E_1 et E_3 . L'état du système est une combinaison linéaire des états d'énergie E_1 et E_3 , donc les seules valeurs possibles pour une mesure de l'énergie sont E_1 et E_3 .
- **R.13** $\frac{2}{3}$. La probabilité de mesurer la valeur E_3 de l'énergie est donnée par le module carré du coefficient de décomposition linéaire sur l'état propre $\varphi_3(x)$.
- R.14 Non. Puisque les coefficients de décomposition linéaires ne dépendent pas du temps, la valeur moyenne d'une mesure de l'énergie du système ne dépend pas du temps non plus. En effet, la valeur moyenne d'une mesure de l'énergie du système est donnée par $\langle E \rangle = \sum_i |c_i|^2 E_i = \frac{1}{3} E_1 + \frac{2}{3} E_3$ qui est indépendant du temps.

6 Inégalité de Heisenberg

QUESTIONS

- **Q.1** Comment s'écrit l'opérateur \hat{x} en représentation p?
- **Q.2** Quelle est l'expression de la valeur moyenne de l'opérateur \hat{p}_x en représentation x?
- **Q.3** Quelle est l'expression de la valeur moyenne de l'opérateur \hat{x} en représentation p?
- Q.4 Un système, dont le hamiltonien est indépendant du temps, est dans un état d'énergie E_1 correspondant à une valeur propre du hamiltonien. Quel est le temps caractéristique d'évolution temporelle du système?
- Q.5 Existe-t-il un opérateur autoadjoint associé à la variable temporelle?
- **Q.6** Considérons une fonction d'onde $\psi(x)$ du système, et sa transformée de FOURIER $\varphi(p_x)$. Est-ce que cette égalité est vraie $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(p_x)|^2 dp_x$?
- Q.7 Est-il équivalent de traiter la dynamique d'un système en représentation x et représentation p?
- Q.8 Quel est le temps caractéristique d'évolution d'un système dont la fonction d'onde est

$$\psi(x,t) = c_3 \varphi_3(x) e^{-i\frac{E_3 t}{\hbar}} + c_3 \varphi_8(x) e^{-i\frac{E_8 t}{\hbar}},$$

où $\varphi_3(x)$ et $\varphi_8(x)$ sont les fonctions propres de l'observable hamiltonien correspondant aux valeurs propres E_3 et E_8 , respectivement, et où c_3 et c_8 sont des constantes?

- Q.9 On construit en laboratoire un appareil de mesure formé à partir d'une observable \widehat{A} bien identifiée. Soient λ et $|\lambda\rangle$ les valeurs propres et kets propres de \widehat{A} . Toutes les les valeurs propres sont non dégénérées. L'appareil mesure $f(\widehat{A})$, une fonction de l'observable \widehat{A} (typiquement un polynôme). Quelle expression prédit la valeur moyenne quantique des résultats de mesure de l'appareil?
- Q.10 On considère un système à deux niveaux dont l'observable hamiltonien s'écrit $\hat{H} = E_0 |1\rangle \langle 1| + \sqrt{2}E_0 |1\rangle \langle 2| + \sqrt{2}E_0 |2\rangle \langle 1|$, où $|1\rangle$ et $|2\rangle$ sont deux vecteurs orthonormés qui forment une base et E_0 une constante réelle positive. À l'instant initial, le système se trouve dans l'état $|1\rangle$. Que vaut le probabilité de trouver le système dans l'état $|1\rangle$ après un temps t?

 Indications: écrire la matrice de l'observable hamiltonien dans la base $(|1\rangle, |2\rangle)$ Ensuite, chercher les valeurs propres et les vecteurs propres de l'observable hamiltonien $|E_1\rangle$ et $|E_2\rangle$, et réécrire les vecteurs $|1\rangle$,

 $|2\rangle$ dans la base ($|E_1\rangle$, $|E_2\rangle$). En sachant qu'à l'instant t=0 le système se trouve dans l'état $|1\rangle$, calculer le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ dans la base ($|E_1\rangle$, $|E_2\rangle$) pour t>0, et calculer ensuite la probabilité demandée.

RÉPONSES

R.1 $i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$

- **R.2** $\langle \widehat{p}_x \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x,t) dx$. En représentation x, l'opérateur impulsion selon x s'écrit $\widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$.
- **R.3** $\langle \widehat{x} \rangle = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^{\star}(p_x, t) \frac{\partial}{\partial p_x} \varphi(p_x, t) dp_x$. En représentation p, l'opérateur impulsion selon x s'écrit $\widehat{x} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^{\star}(p_x, t) \frac{\partial}{\partial p_x} \varphi(p_x, t) dp_x$.

 $\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}$. Attention par contre, puisque on est en représentation p, il faudra calculer le produit scalaire dans l'espace des impulsions.

- R.4 Le système n'évoluera pas dans le temps.
- R.5 Le temps est un paramètre, et pas une observable. Il n'y a donc pas d'opérateur autoadjoint associé à la variable temporelle.
- R.6 Cette égalité est valable d'après l'isométrie de la transformée de FOURIER.
- R.7 C'est équivalent parce que le choix de la représentation correspond simplement à un choix de la base de l'espace de HILBERT.

9

 $\mathbf{R.8} \quad \tau = \frac{h}{|E_8 - E_3|}$

 $R.9 \left[\sum_{\lambda} f(\lambda) |\langle \lambda, \psi \rangle|^2 \right]$. D'après le principe de la mesure, la probabilité d'un résultat de mesure d'une obser-

vable est égale au module carré de la projection de l'état quantique du système sur le sous-espace propre correspondant à la valeur propre mesuré. La probabilité de mesurer la valeur λ est $P(\lambda) = |\langle \lambda, \psi \rangle|^2$. C'est aussi la probabilité de mesurer $f(\lambda)$ puisque dans la base diagonale de \widehat{A} , $f(\widehat{A})$ est aussi diagonale et partage les mêmes vecteurs propres. La moyenne est la somme pondérées des résultats possibles.

R.10 Écriture du hamiltonien dans la base $(|1\rangle, |2\rangle)$:

$$\widehat{H}_1 = E_0 \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}_{(|1\rangle, |2\rangle)}.$$

On en déduit son spectre et des vecteurs propres associés :

$$\operatorname{Sp}\widehat{H} = \{-E_0, 2E_0\} \quad |E_1\rangle := E_0 \begin{pmatrix} 1 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} |E_2\rangle := E_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Le hamiltonien est diagonalisable dans la base $(|E_1\rangle, |E_2\rangle)$:

$$\widehat{H}_2 = E_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}_{(|E_1\rangle, |E_2\rangle)}$$

On en déduit la relation

$$\widehat{H}_1 = P\widehat{H}_2 P^{-1}$$

avec

$$P = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} = P^{-1}$$

d'où

$$|1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} |E_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |E_2\rangle \ \text{et} \ |2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |E_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |E_2\rangle$$

Le vecteur d'état du système s'écrit sous la forme :

$$|\psi(t)\rangle = C_1 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{-E_0 t}{\hbar}} |E_1\rangle + C_2 \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{2E_0 t}{\hbar}} |E_2\rangle$$

Or à l'instant t=0, le système se trouve dans l'état $|1\rangle$ ce qui s'écrit

$$|\psi(t=0)\rangle = C_1 |E_1\rangle + C_2 |E_2\rangle = |1\rangle \text{ donc } C_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} \text{ et } C_2 = \sqrt{\frac{2}{3}}.$$

En remplaceant $|E_1\rangle$ et $|E_2\rangle$ dans on obtient

$$|\psi(t)\rangle = \underbrace{\left(\frac{1}{3}e^{i\frac{E_0t}{\hbar}} + \frac{2}{3}e^{-i\frac{2E_0t}{\hbar}}\right)}_{:=C}|1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}\left(e^{-i\frac{2E_0t}{\hbar}} - e^{i\frac{E_0t}{\hbar}}\right)|2\rangle$$

$$P_{|1\rangle} = |C|^2$$

$$P_{|1\rangle} = \frac{1}{9} \left[5 + 4 \cos \left(\frac{3E_0 t}{\hbar} \right) \right].$$