Propriétés de l'équation de Schrödinger

$$\boxed{\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t}}$$

Linéaire → **principe de superposition** : la somme de deux solutions est encore une solution.

Linéaire → une relation de dispersion **non linéaire** débouche sur un étalement **croissant** de l'onde libre !

Évolution d'une grandeur :

$$\frac{d\langle O\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\left\langle \psi, \hat{O}\psi \right\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\left\langle \psi, \hat{O}\psi \right\rangle = \left\langle \frac{\partial\psi}{\partial t}, \hat{O}\psi \right\rangle + \left\langle \psi, \hat{O}\frac{\partial\psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi, \hat{O}\psi \right\rangle + \left\langle \psi, \hat{O}\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi \right\rangle$$

$$= \left\langle \psi, -\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\,\hat{O}\psi \right\rangle + \left\langle \psi, \hat{O}\,\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\psi \right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \psi, \left(\hat{O}\,\hat{H} - \hat{H}\,\hat{O}\right)\psi \right\rangle$$

$$\boxed{\frac{d\langle O\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle \left[\hat{H}, \hat{O}\right] \right\rangle} \qquad \left[\hat{H}, \hat{O}\right] = \hat{H}\,\hat{O} - \hat{O}\,\hat{H}$$

MINES ParisTech

Les position et impulsion moyennes

$$\boxed{\frac{d\langle O\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{O}\right]\right\rangle}$$

on prend $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}$

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right]=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2\cdot\hat{x}-\hat{x}\cdot\hat{p}_x^2\right)$$

$$=\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2\cdot\hat{x}-\hat{p}_x\cdot\hat{x}\cdot\hat{p}_x+\hat{p}_x\cdot\hat{x}\cdot\hat{p}_x-\hat{x}\cdot\hat{p}_x^2\right)$$

$$=\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\,\hat{p}_x-i\hbar\,\hat{p}_x\right)=\boxed{-\frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x}$$

$$\boxed{\frac{d\langle x\rangle}{dt}=\frac{\langle p_x\rangle}{m}}$$

$$\left[\hat{H},\hat{p}_x\right]=\hat{V}\cdot\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left(V\times\cdot\right)$$

$$=\boxed{i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}}$$

$$\boxed{\frac{d\langle p_x\rangle}{dt}=-\left\langle\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{d\langle\vec{r}\rangle}{dt}&=\frac{\langle\vec{p}\rangle}{m}\\ \frac{d\langle\vec{p}\rangle}{dt}&=-\left\langle\frac{\partial V}{\partial\vec{r}}\right\rangle\end{aligned}}$$

La limite classique

$$\boxed{\frac{d\langle O\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{O}\right]\right\rangle}$$

$$\boxed{\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \left\{F,H\right\}}$$

De manière générale : $\left\{F,H\right\} = \sum_i \left(\frac{\partial F}{\partial \vec{r}_i}\frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial F}{\partial \vec{p}_i}\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i}\right)$

$$\left[\hat{H},\hat{\vec{r}}\right] = -i\hbar\frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{p}} \qquad \left[\hat{H},\hat{\vec{p}}\right] = i\hbar\frac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{r}}$$

Et donc : $$\boxed{\begin{cases} \dfrac{d\left\langle \vec{r}\right\rangle}{dt} = \left\langle \dfrac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{p}}\right\rangle \\[2ex] \dfrac{d\left\langle \vec{p}\right\rangle}{dt} = -\left\langle \dfrac{\partial \hat{H}}{\partial \vec{r}}\right\rangle \end{cases}}$$

Valeurs mesurées

↔ valeurs moyennes

Equations d'Ehrenfest

Paul Ehrenfest
(1880 - 1933)

La mesure en physique quantique

Comment remonter à une mesure de probabilité ?

Moment d'ordre *n* d'une distribution de probabilités

$$M_n = \langle u^n \rangle = \int u^n P(u)\ du$$

Fonction caractéristique d'une distribution de probabilités

$$Q(v) = \langle e^{iuv} \rangle = \int e^{iuv}\ P(u)\ du$$

$$Q(v) = \int e^{iuv}\ P(u)\ du = \sum_n \frac{(iv)^n}{n!} \int u^n P(u)\ du = \boxed{\sum_n \frac{(i)^n M_n}{n!}\ v^n}$$

Si on peut déterminer tous les M_n,
alors on peut en déduire $P(u)$

Certitude et incertitude

Les opérateurs correspondant à des quantités mesurables sont auto-adjoints.

Valeur mesurable : réelle $$\left\langle \psi, \hat{A}\psi \right\rangle = \left\langle \hat{A}\psi, \psi \right\rangle = \left\langle \psi, \hat{A}\psi \right\rangle^*$$

Certitude : $$(\Delta A)^2 = \left\langle \psi, \hat{A}^2\psi \right\rangle - \left\langle \psi, \hat{A}\psi \right\rangle^2 = 0$$

$$\boxed{\hat{A}\psi = a\psi}$$

Seuls les **états propres** de A autorisent une mesure certaine.

Non-commutativité $$[\hat{x}, \hat{p}_x] = x \cdot \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\cdot) = i\hbar\, I$$

Non-commutation des opérateurs $\Rightarrow$ incompatibilité de mesure

Quelle est la loi de probabilité d'une observable ?

Supposons que l'on ait une observable A caractérisée par un opérateur $\hat{A}$

On considère un système dans l'état ψ

Décomposition de ψ sur la base orthonormée des états propres de $\hat{A}$ $\left(a_j, e_j\right)$

$$\psi = \sum_{j=1}^{+\infty} \alpha_j e_j \qquad \text{avec} \quad \hat{A} e_j = a_j e_j \quad \text{et} \quad \sum_j |\alpha_j|^2 = 1$$

Moment : $$M_n = \left\langle \psi, \hat{A}\psi \right\rangle = \left\langle \sum_j \alpha_j e_j, \hat{A}^n \left(\sum_\ell \alpha_\ell e_\ell \right) \right\rangle = \left\langle \sum_j \alpha_j e_j, \sum_\ell \alpha_\ell a_\ell^n e_\ell \right\rangle$$

$$= \sum_{j,\ell} \alpha_j^* \alpha_\ell \, a_\ell^n \left\langle e_j, e_\ell \right\rangle = \sum_{j,\ell} \alpha_j^* \alpha_\ell \, a_\ell^n \; \delta_{j,\ell} = \boxed{\sum_j |\alpha_j|^2 a_j^n}$$

Fonction caractéristique :

$$F(u) = \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\sum_j |\alpha_j|^2 a_j^n \right) \frac{i^n}{n!} u^n = \sum_j |\alpha_j|^2 \left(\sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(iua_j)^n}{n!} \right) = \boxed{\sum_j |\alpha_j|^2 e^{iua_j}}$$

La loi de probabilité a comme support les $\{a_j\}$!!!

MINES ParisTech

Observables et mesure

On appelle ***observable*** toute grandeur physique dont les fonctions propres de l'opérateur correspondant forment une base.

On retrouve la structure d'espace de Hilbert dans cette base. Pour un spectre **discret** :

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{n,k} \alpha_{n,k}\ e_{n,k}(\vec{r})$$

Valeur moyenne de A

$$\left\langle \psi, \hat{A}\psi \right\rangle = \left\langle \sum_{n,k} \alpha_{n,k}\ e_{n,k}(\vec{r}), \hat{A}\left(\sum_{n',k'} \alpha_{n',k'}\ e_{n',k'}(\vec{r}) \right) \right\rangle = \boxed{\sum_{n,k} \left|\alpha_{n,k}\right|^2 a_n}$$

$$\boxed{P_n = \sum_{k} \left|\alpha_{n,k}\right|^2}$$ définit la probabilité de mesurer a_n

La réduction du paquet d’ondes

- L’évolution hors de toute mesure du système est causale (déterministe). La fonction d’onde du système se répartit dans tout l’espace de Hilbert, i.e. possiblement sur tous les états propres d’une quelconque observable.

- Lors d’une mesure, la valeur mesurée correspond à l’une des valeurs propres possibles de l’observable correspondante. Après la mesure, la fonction d’onde est « réduite », i.e. projetée sur le sous-espace correspondant à cette valeur.

- Cette réduction du paquet d’ondes est un postulat supplémentaire obligatoire qui rend compte de l’interaction du système quantique avec la mesure macroscopique.

Commutation et incertitude

Si deux opérateurs commutent, alors ils possèdent une base commune de vecteurs propres.

On considère un vecteur propre de A : $$A\,u = \lambda\,u$$

On le développe sur les états propres de B : $$u = \sum_n c_n\, v_n$$

donc $$B\,u = B\sum_n c_n\, v_n = \sum_n c_n b_n\, v_n$$

$$AB\,u = AB\sum_n c_n\, v_n = A\sum_n c_n b_n\, v_n = \sum_n c_n b_n\, A v_n$$

$$BA\,u = B\lambda\sum_n c_n\, v_n = \sum_n \lambda c_n\, B v_n = \sum_n \lambda c_n b_n\, v_n$$

donc $$[A,B]u = \sum_n c_n b_n (A - \lambda I) v_n = 0$$ **vecteur propre de B**

On peut effectuer une mesure simultanée des deux quantités correspondantes avec une précision arbitraire.

Commutation et incertitude

$$\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=x\times\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(\cdot)-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(x\times\cdot)=i\hbar\, I=\left[\hat{y},\hat{p}_y\right]\ =\left[\hat{z},\hat{p}_z\right]$$

On considère deux observables $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ de commutateur anti-hermitien

$$\Delta A^2=\left\langle A^2\right\rangle-\left\langle A\right\rangle^2 \qquad\qquad \Delta B^2=\left\langle B^2\right\rangle-\left\langle B\right\rangle^2$$

$$\left\langle A^2\right\rangle\left\langle B^2\right\rangle=\left\|A\psi\right\|^2\left\|B\psi\right\|^2 \quad \geq\left|\left\langle A\psi,B\psi\right\rangle\right|^2$$

$$\left\langle A\psi,B\psi\right\rangle=\left\langle\psi,AB\psi\right\rangle$$

$$=\left\langle\psi,\left(\frac{(AB+BA)}{2}+\frac{(AB-BA)}{2}\right)\psi\right\rangle$$

$$\boxed{\Delta A\ \Delta B\geq\frac{1}{2}\left|\left\langle\left[A,B\right]\right\rangle\right|}$$

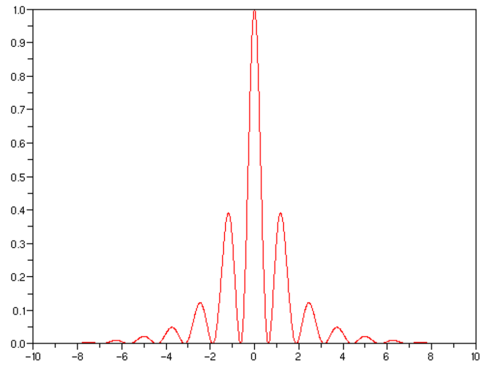
Relation d'incertitude d'Heisenberg

Werner Heisenberg
(1901 – 1976)

Le principe d'incertitude d'Heisenberg

La mesure de la position modifie significativement l'impulsion

Dans la diffraction de la lumière par une ouverture, la distribution angulaire d'intensité après diffraction est le module carré de la transformée de Fourier de l'amplitude sortant de l'ouverture.



Etalement de la distribution : $\Delta k_z \approx \dfrac{1}{a}$

Etalement de l'impulsion : $\Delta p_z \approx \dfrac{\hbar}{a}$

Exactement : $\Delta z \cdot \Delta k_z \geq \dfrac{1}{2}$

$$\boxed{\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Il y a impossibilité à « déterminer z et p_z parfaitement » simultanément

Ensemble complet d'observables compatibles

On considère $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ deux observables compatibles (le commutateur est nul).

Si la mesure simultanée de $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ suffit à déterminer de manière unique le vecteur propre, alors $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ forment un **ensemble complet d'observables compatibles** (ECOC).

Si la mesure simultanée de $\boldsymbol{A}$ et $\boldsymbol{B}$ ne suffit pas à déterminer de manière unique le vecteur propre, alors on peut ajouter d'autres observables pour former finalement un ensemble complet d'observables compatibles.

<u>Exemples</u> : le Hamiltonien dans le puits quantique.
les trois impulsions selon les axes.

Après une mesure, l'état du système est connu parfaitement. On a affaire à un **état pur**.

La relation d'incertitude temps-énergie

On considère un système à deux niveaux d'énergie : E_1 et E_2

L'état du système se décompose dans la base des états propres de $\hat{H}$

$$\psi = a_1\ \psi_1(x,t) + a_2\ \psi_2(x,t) = \alpha_1(t)\chi_1(\vec{x}) + \alpha_2(t)\chi_2(\vec{x})$$

$$\boxed{\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t} &= \hat{H}\,\psi_1 = E_1\,\psi_1 \\ i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t} &= \hat{H}\,\psi_2 = E_2\,\psi_2 \end{aligned}}$$

$$\alpha_1(t) = e^{-i\omega_1 t} = e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}}$$

$$\alpha_2(t) = e^{-i\omega_2 t} = e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}$$

$$|\psi|^2 = |\alpha_1(t)\ \chi_1 + \alpha_2(t)\ \chi_2|^2 = \left|a_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}}\ \chi_1 + a_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}\ \chi_2\right|^2$$

$$= |a_1\ \chi_1|^2 + |a_2\ \chi_2|^2 + 2\,\mathrm{Re}\left(a_1^* a_2\ \chi_1^* \chi_2 \exp\left(-\frac{i(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)\right)$$

Oscillations de période : $\boxed{T = \dfrac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1}}$

$$\boxed{\Delta E \cdot \Delta t \approx \hbar}$$

Les états quantiques à plusieurs particules

Un état quantique à N particules discernables est défini par un vecteur. En représentation x, c'est une fonction complexe :

$$\psi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t\right)$$ amplitude de probabilité

C'est une fonction de carré sommable, dont les dérivées premières sont continues sur l'intérieur du domaine d'existence.

Observable position :

$$\hat{\vec{r}}_i \ \psi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t\right) = \vec{r}_i \ \psi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t\right)$$

Observable impulsion :

$$\hat{\vec{p}}_i \ \psi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t\right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \ \psi\left(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N, t\right)$$

Règle de commutation : $\boxed{\left[\hat{x}_{i,\alpha}, \hat{p}_{j,\beta}\right] = i\hbar\, \delta_{i,j}\, \delta_{\alpha,\beta}}$

Les états quantiques à plusieurs particules

Evolution du système en l'absence de toute mesure

$$\hat{H}\,\psi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N,t\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\;\psi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N,t\right)$$

causale, déterministe

Evolution instantanée lors d'une mesure de l'observable « discrète » A

avant la mesure $\psi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N,t\right) = \sum_{n,k}\alpha_{n,k}(t)\;\varphi_{n,k}\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N\right)$

Vecteurs propres de A

après la mesure

$$\psi\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N,t\right) = \sum_{k}\frac{\alpha_{n,k}(t)}{\sum_k\left|\alpha_{n,k}(t_0)\right|^2}\;\varphi_{n,k}\left(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{r}_N\right)$$

La mesure a donné a_n avec la probabilité : $\boxed{Pn = \sum_k\left|\alpha_{n,k}(t_0)\right|^2}$

Pour une observable « continue », on obtient une densité de probabilité

La notation de Dirac


Paul Dirac
(1902 - 1984)

- Un état quantique est noté sous la forme : $|\psi\rangle$
- La forme linéaire associée à cet état est notée : $\langle\psi|$
- La forme linéaire $\langle\varphi|$ donne sur le vecteur $|\psi\rangle$: $\langle\varphi|\psi\rangle$
- Linéarité : $|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$

$$\langle\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2| = \lambda_1^*\langle\psi_1| + \lambda_2^*\langle\psi_2|$$

- Le projecteur sur $|\psi\rangle$ orthogonalement à $|\varphi\rangle$ est : $|\psi\rangle\langle\varphi|$
- $|\psi\rangle\langle\psi|$ est le projecteur sur $|\psi\rangle$
- L'action d'un opérateur A est : $A|\psi\rangle$
- La forme linéaire associée à ce vecteur est : $\langle\psi|A$

La notation de Dirac

Décomposition sur une base discrète de l'espace de Hilbert

$$|\psi\rangle = \sum_{n,(\ell)} c_{n,(\ell)} \ |n,(\ell)\rangle$$

Coefficients : $$\langle m,(k)|\psi\rangle = \sum_{n,(\ell)} c_{n,(\ell)} \ \langle m,(k)|n,(\ell)\rangle = c_{m,(k)}$$

$c_{m,(k)}$: amplitude de probabilité de l'état $m,(k)$

$\left|c_{m,(k)}\right|^2$: probabilité de « présence » dans l'état $m,(k)$

Cas particuliers : $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle$ $\qquad$ $\varphi(\vec{p}) = \langle \vec{p}|\psi\rangle$

$$\boxed{\langle \vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}}$$

La nature fondamentale de la physique quantique

- Des entités superposables → espace vectoriel

$$|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \quad \rightarrow \quad \frac{\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle}{\left\| \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \right\|}$$

- Des représentations multiples

$$\psi(\vec{x},t), \varphi\left(\vec{k},t\right), \left(\lambda_i(t)\right) \quad \text{avec} \quad \psi(t) = \sum_i \lambda_i(t) u_i$$

- Des quantités mesurables définies par des opérateurs

Observable A , moyenne $\langle \mathrm{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

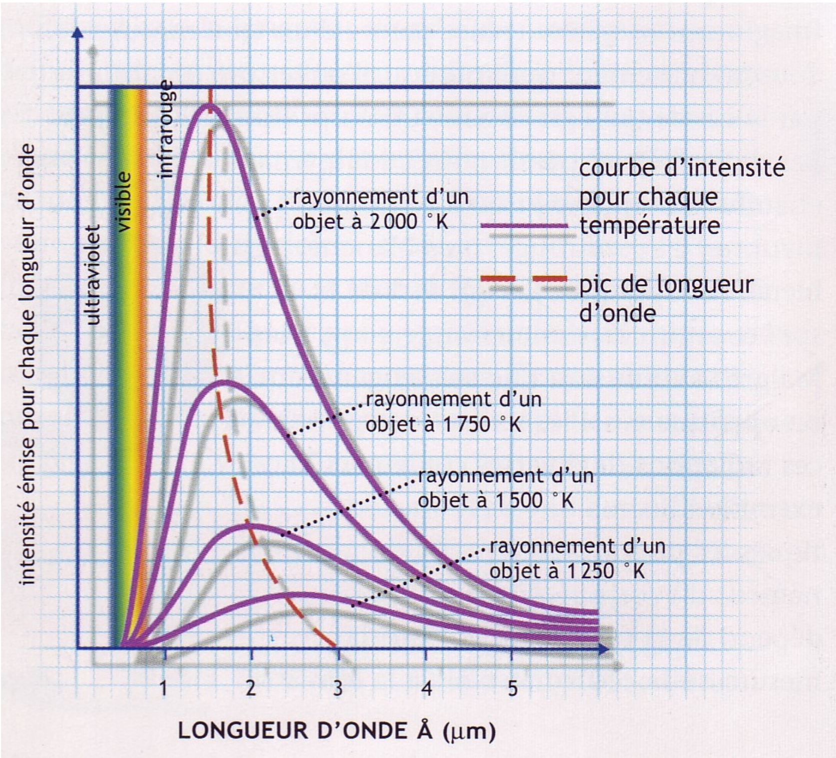
- Une équation d'évolution déterministe $\hat{H}\,\psi = i\hbar \dfrac{\partial \psi}{\partial t}$

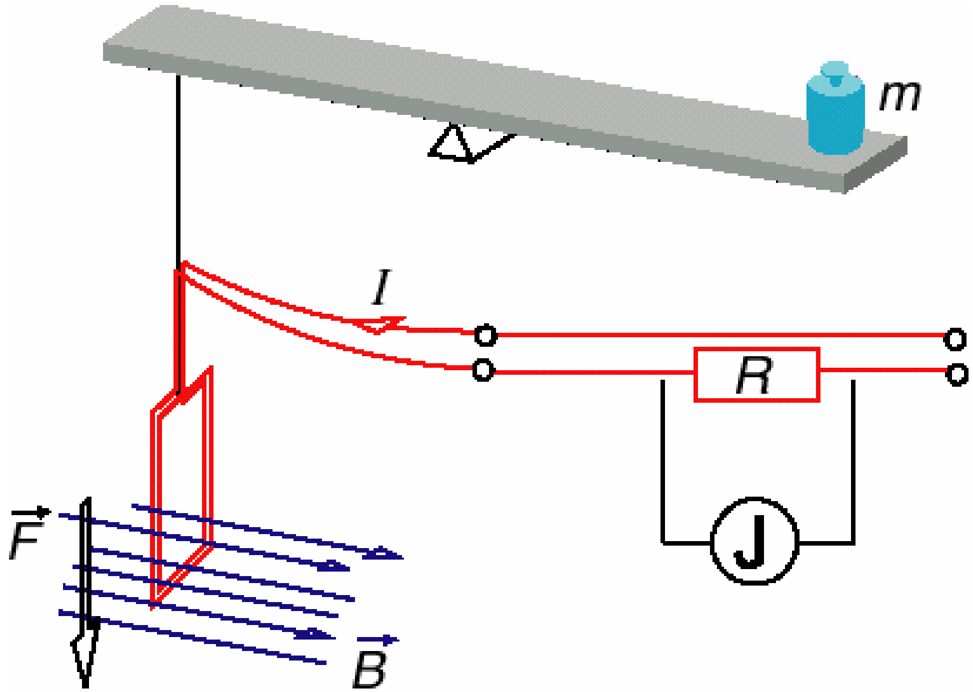
- Une mesure probabiliste $\left(\lambda_i(t)\right) \rightarrow a_j \ , P_j(t) = \left|\lambda_j(t)\right|^2$

Les postulats de la physique quantique

- **Postulat 1 :** Tout état est représenté par un **vecteur normé** d'un espace de Hilbert.
- **Postulat 2 :** À toute observable est associé un **opérateur hermitien** via le principe de correspondance.
- **Postulat 3 :** Les résultats de mesure d'une observable ne peuvent être que les **valeurs propres** de l'opérateur associé.
- **Postulat 4 :** Le produit scalaire de l'état avec un vecteur propre de l'opérateur donne l'**amplitude de probabilité** de mesure de la valeur propre correspondante.
- **Postulat 5 :** Après la mesure, l'état du système est la **projection** de l'état antérieur sur le sous-espace vectoriel correspondant à la valeur propre mesurée.
- **Postulat 6 :** L'évolution temporelle d'un état est décrite par **l'équation de Schrödinger**.

Mesure de la constante de Planck





$$\frac{1}{V}\frac{d\overline{U}}{d\omega} = \frac{1}{\pi^2 c^3}\frac{\hbar\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}$$

Balance du Watt

$$\frac{h}{m} = \frac{4gv}{A}$$

Licence d’usage dans un contexte public, sans modification