MECANIQUE QUANTIQUE

COURS 6 – COMMUTATION DES OBSERVABLES

QUENTIN GLORIEUX

3P001 – UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE 2015-2016

PLAN

- Relations de commutation
- Démonstration des relations d'incertitude d'Heisenberg
- Théorème d'Ehrenfest
- Opérateur unitaire d'évolution
- Représentation de Schrödinger et de Heisenberg
- ECOC : Ensemble complet d'observables qui commutent
- Opérateur densité

RELATIONS DE COMMUTATION

Comme pour le formalisme de la fonction d'onde on utilise les analogues classiques pour trouver les relations de commutation.

On a déjà vu $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$

Faire la démonstration

Regardons par exemple le moment cinétique : $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}} \wedge \hat{\boldsymbol{p}}$

Donnez l'expression de $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ dans le formalisme de la fonction d'onde.

Quelle est la relation de commutation $[\hat{L}_x, \hat{L}_y]$?

De manière générale on en déduit : $\hat{\boldsymbol{L}} \times \hat{\boldsymbol{L}} = i\hbar\hat{\boldsymbol{L}}$

RELATION D'INCERTITUDE

Application des relations de commutation :

- Démonstration du principe d'incertitude d'Heisenberg.

Soit A et B deux observables. Supposons que l'on mesure A puis B.

Une mesure de A projette l'état vers un état propre de A : $|\psi_a\rangle$
Si $|\psi_a\rangle$ n'est pas un vecteur propre de B alors une mesure de B donne la valeur b (associée au vecteur propre $|\psi_b\rangle$) avec la probabilité $|\langle\psi_b|\psi_a\rangle|^2$

Il y a une incertitude sur la mesure de B. De plus une mesure ultérieure de A ne donnera pas nécessairement la même valeur.

On dit que A et B sont incompatibles lorsque A et B ne commutent pas

Inversement si A et B commutent, il existe une base formée des vecteurs propres communs à A et B. On peut alors réaliser les mesures dans le sens que l'on veut sans changer le resultat.

RELATION D'INCERTITUDE

Commençons par centrer les variables, c'est-à-dire par poser $\hat{A}' = \hat{A} - \langle a \rangle$, de sorte que $\langle \hat{A}' \rangle = 0$; on a alors :

$$(\Delta a)^2 = \langle \psi | \hat{A}'^2 | \psi \rangle \quad .$$

De même, pour la deuxième observable $\hat{B}$, on a $(\Delta b)^2 = \langle \psi | B'^2 | \psi \rangle$ avec $\hat{B}' = \hat{B} - \langle b \rangle$.

Considérons, pour un état $|\psi\rangle$ quelconque, le vecteur $(\hat{A}' + i\lambda\hat{B}')|\psi\rangle$, avec λ réel. Le carré de la norme de ce vecteur est :

$$\begin{aligned} \|(\hat{A}' + i\lambda\hat{B}')|\psi\rangle\|^2 &= \langle \psi | (\hat{A}' - i\lambda\hat{B}')(\hat{A}' + i\lambda\hat{B}') | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{A}'^2 | \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | \hat{B}'^2 | \psi \rangle + i\lambda \langle \psi | [\hat{A}', \hat{B}'] | \psi \rangle \\ &= \Delta a^2 + \lambda^2 \Delta b^2 + i\lambda \langle \psi | [\hat{A}', \hat{B}'] | \psi \rangle \quad . \end{aligned}$$

Puisque $\hat{A}'$ et $\hat{B}'$ sont hermitiens, l'opérateur $i[\hat{A}', \hat{B}']$ est également hermitien et le dernier terme est réel. L'expression ci-dessus étant le carré de la norme d'un vecteur, doit être positive quel que soit λ ; le discriminant du trinôme en λ doit donc être négatif (inégalité de Schwarz) d'où :

$$\Delta a \; \Delta b \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle| \tag{7.4}$$

car $[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}]$.

THÉORÈME D'EHRENFEST

Evolution au cours du temps de la valeur moyenne d'un observable

On note $\langle a \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

On cherche : $\frac{d}{dt}\langle a \rangle$

Pour un observable ne dépendant pas explicitement du temps on montre que l'on obtient :

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle$$

La valeure moyenne d'une observable qui commute avec H ne dépend donc pas du temps.

INCERTITUDE TEMPS-ENERGIE

On a vu une variation du principe d'incertitude d'Heisenberg entre le temps et l'énergie.

Or le temps n'est pas une observable.

Démonstration de $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$

OPÉRATEUR UNITAIRE D'ÉVOLUTION

On introduit l'opérateur d'évolution $\hat{U}(t, t_0)$ définit par :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Propriétés :

- Unitarité
- Conservation de la norme
- Transitivité
- Element neutre et Inverse

EQUATION D'EVOLUTION

En utilisant l'opérateur d'évolution on peut écrire :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\varphi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0)\right]|\varphi(t_0)\rangle$$

A l'aide de l'équation de Schrödinger on trouve :

$$\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0)\right]|\varphi(t_0)\rangle = H(t)U(t,t_0)|\varphi(t_0)\rangle.$$

Et donc $\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t,t_0) = H(t)U(t,t_0)$

Cependant il faut faire attention, en général $U(t,t_0) \neq \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,\mathrm{d}t'\right)$.
car il n'y a aucune raison pour que $[H(t'), H(t'')] = 0$.

EVOLUTION POUR UN HAMILTONIEN INDEPENDANT DU TEMPS

On a l'équation $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}\hat{U}(t,t_0)$

qui s'intègre en : $\hat{U}(t,t_0) = \exp\left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}\right)$

On peut faire un dévelopement limité de cette expression :

$$\hat{U}(t,t_0) = 1 - i\frac{(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}$$

Cela va décrire l'évolution infinitésimale Hamiltonienne :
experssion *utile pour les simulations numériques.*

REPRESENTATIONS DE SCHRODINGER ET DE HEISENBERG

La valeur moyenne d'un observable s'écrit : $\langle a(t)\rangle = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$

On peut écrire : $\langle a(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|U(t_0,t)AU(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

ou

$$\langle a(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\exp\left(\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}\right)A\exp\left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}\right)|\psi(t_0)\rangle$$

On peut alors définir l'observable A dans la représentation de Heisenberg :

$$\hat{A}_{Heis}(t) = \left(\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}\right)\hat{A}\exp\left(-\frac{i(t-t_0)}{\hbar}\hat{H}\right)|\psi(t_0)\rangle$$

On a alors :

$$\langle a(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{A}_{Heis}(t)|\psi(t_0)\rangle$$

FORME MATRICIELLE DE L EQUATION DE SCHRODINGER

On peut écrire l'équation de Schrodinger sous une forme matricielle de la facon suivante :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\alpha|\varphi(t)\rangle = \langle\alpha|H(t)|\varphi(t)\rangle = \sum_\beta\langle\alpha|H(t)|\beta\rangle\langle\beta|\varphi(t)\rangle,$$

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_\alpha(t) = \sum_\beta H_{\alpha\beta}(t)\,c_\beta(t).$$

OBSERVABLES QUI COMMUTENT

On rappelle le théorème important :

Si deux observables commutent alors il existe une base formée des vecteurs propres communs à ces deux observables.

Exemple : oscillateur harmonique en dimension 2

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 = \hat{H}_x + \hat{H}_y$$

On résout séparément les problèmes sur les deux axes car Hx et Hy commutent.

$$\hat{H}_x \phi_{n_1}(x) = E_{n_1}\phi_{n_1}(x) \quad ; \quad \hat{H}_y \phi_{n_2}(y) = E_{n_2}\phi_{n_2}(y) \ ,$$

Et : $E_{n_1,n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega$

$\Phi_{n_1,n_2}(x,y) = \phi_{n_1}(x)\,\phi_{n_2}(y) \quad .$

ECOC : ENSEMBLE COMPLET D'OBSERVABLES QUI COMMUTENT

On dit que des opérateurs A,B,C... forment un ECOC si la base propre commune de ces opérateurs est unique.

Autrement dit, si pour chaque ensemble de valeurs propres correspond un vecteur propre unique.

Cette notion est très importante car elle permet d'être sur que l'on précise correctement les conditions initiales d'une expérience.

Pour décrire un état quantique complétement préparé, il faut donner les valeurs propres de chaque opérateur de l'ECOC.

Comme les observables commutent, on peut faire ces mesures dans l'ordre que l'on veut : cela n'a pas d'importance.

Toutes mesures ultérieures sur un observable de l'ECOC, redonnera la meme valeur propre (si l'Hamiltonien commute avec tout l'ECOC)

OPÉRATEUR DENSITÉ : CAS PUR

Reprenons l'exemple de l'oscillateur harmonique 2D.

Si on mesure l'énergie $2\hbar\omega$ on ne peut pas répondre avec certitude à la questiond : dans quel état est mon système ?

$|n_x = 1 \ , \ n_y = 0\rangle$, ou $|n_x = 0 \ , \ n_y = 1\rangle$ ou toute combinaison linéaire

Parfois on ne peut donc pas décrire de manière non ambigue notre systeme en utilisant les vecteurs d'états.

On doit utiliser un formalisme plus général pour les états mal préparés : <u>l'opérateur densité</u>

Dans le cas pur (état bien préparé) on le défini ainsi :

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$$

C'est le projecteur sur l'état $|\psi\rangle$

ETATS PURS

Rappel. On définit la trace d'un opérateur par la somme des terms diagonaux :

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}) = \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle$$

On a : $\mathrm{Tr}(\hat{A}\,\hat{B}) = \sum_n \langle n|\hat{A}\,\hat{B}|n\rangle = \sum_{n,m} \langle n|\hat{A}|m\rangle\ \langle m|\hat{B}|n\rangle = \sum_m \langle m|\hat{B}\,\hat{A}|m\rangle$

$= \mathrm{Tr}(\hat{B}\,\hat{A}) \ ,$

Pour l'opérateur densité $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ on a : $\mathcal{P}(a_\alpha) = \mathrm{Tr}\left(\hat{P}_\alpha\hat{\rho}\right)$

avec $\mathcal{P}(a_\alpha) = ||\hat{P}_\alpha|\psi\rangle||^2 = \langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle$

En particulier $\langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ va se réecrire :

$$\langle a\rangle = \mathrm{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{\rho}\right)$$

EVOLUTION DE L'OPERATEUR DENSITÉ

On a : $i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}\langle\psi(t)| + i\hbar|\psi(t)\rangle\frac{d\langle\psi(t)|}{dt}$

Ou en encore $i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| - |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\hat{H}$

Ce qui s'écrit simplement sous la forme :

$$i\hbar\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)\right]$$

CAS IMPUR : MELANGE STATISTIQUE

On ne sait pas toujours dans quel état est notre systeme.

Parfois on a un connaissance partielle de l'état. On généralise l'opérateur densité sous la forme :

$$\hat{\rho} = \sum_i \Pi_i \, |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

avec $\{|\psi_i\rangle\}$ une base propre de ρ

et Π_i la probabilité que mon état soit dans l'état $|\psi_i\rangle$

On a alors $\langle a\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{A}\,\hat{\rho}) = \sum_i \Pi_i \, \langle\psi_i|\hat{A}|\psi_i\rangle$.

C'est un mélange statistique et plus une superposition cohérente !

PAS D'INTERFERENCES !