Résumé du cours de mécanique quantique : séance 4

Clément Mazzocchi
d'après le cours donné par Éric Cances
École des Ponts ParisTech

2023-2024

Table des matières

Ce quatrième résumé reprend les postulats de la mécanique quantique abordés lors de la séance précédente et énonce les deux postulats manquants. Sont aussi abordées des notions autour des rotations.

1 Rappels

On se place dans un espace de Hilbert complexe séparable $\mathcal{H}$, appelé espace d'états, muni du produit scalaire $\langle\cdot|\cdot\rangle$ et de la norme induite $||\cdot||$.

Exemple 1. — *Pour une particule sans spin en représentation position,* $\mathcal{H} = L^2\left(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}\right)$.
— *Pour un système à deux états (comme un qubit),* $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

La mécanique quantique est régie par des postulats fondamentaux énoncés ci-après.

Postulat 1 (Espace d'états d'un système quantique)**.** — *Tout état pur peut être décrit par un vecteur normalisé* Ψ *de* $\mathcal{H}$*, appelé fonction d'onde, ket* $|\Psi\rangle$*, vecteur d'état...*
— $\forall\theta \in \mathbb{R}$, Ψ *et* $e^{i\theta}\Psi$ *représentent le même état.*
— *Tout vecteur* $\Psi \in \mathcal{H}$ *tel que* $||\Psi|| = 1$ *décrit un état physiquement admissible.*

Postulat 2 (Observable)**.** *À toute quantité physique scalaire* A *est associé un opérateur auto-adjoint sur* $\mathcal{H}$ *noté* $\hat{A}$ *et appelé observable associée à la quantité physique* A.

Exemple 2. *Pour une particule de masse* m *en représentation position dans un potentiel* V*, on considère les opérateurs :*
— $\hat{x_j}$ *(multiplication par* x_j*) pour la position selon l'axe* j,
— $\hat{p_j} = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x_j}$ *pour le moment selon l'axe* j,

— $\hat{H} = \hat{T} + V = \frac{|\hat{\mathbf{p}}|^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{x})$ *(hamiltonien) pour l'énergie.*

Postulat 3 (Résultats possibles d'une mesure)**.** *Le résultat d'une mesure de A est un point de $\sigma\left(\hat{A}\right)$, le spectre de $\hat{A}$.*

Exemple 3.
— $\sigma(\hat{x_j}) = \mathbb{R}$
— $\sigma(\hat{p_j}) = \mathbb{R}$
— $\sigma\left(\hat{T}\right) = \sigma\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\right) = \mathbb{R}_+$
— $\sigma\left(\hat{H}\right)$ *dépend de V :*
  — *Si $V = 0$ (particule libre), $\sigma\left(\hat{H}\right) = \mathbb{R}_+$,*
  — *Si $V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}k|\mathbf{x}|^2$ (oscillateur harmonique), $\sigma\left(\hat{H}\right) = \left(\mathbb{N} + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, où $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, en dimension 3,*
  — *Si $V(\mathbf{X}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|\mathbf{x}|}$ (atome d'hydrogène), $\sigma\left(\hat{H}\right) = \left\{-\frac{E_{Ryd}}{n^2}, n \in \mathbb{N}^*\right\}$.*

De manière générale, le spectre d'un opérateur est composé d'une partie discrète et d'une partid continue, ce qui donne lieu à l'apparition d'états liés (correspondant aux valeurs propres ponctuelles) et d'états de diffusion.

Postulat 4 (Distribution de probabilité des résultats d'une mesure)**.** *Si le système est dans l'état Ψ juste avant la mesure, la probabilité d'obtenir un résultat dans le borélien B est donnée par*

$$\mu_{\hat{A},\Psi}(B) = ||\chi_B\left(\hat{A}\right)\Psi||^2$$

$\mu_{\hat{A},\Psi}$ est une mesure de probabilité sur $\mathbb{R}$.

2 Inégalité de Heisenberg

Si l'on considère $|\Psi_n\rangle$ une base hilbertienne de $\mathcal{H}$ (c'est-à-dire que $\langle\Psi_m|\Psi_n\rangle = \delta_{m,n}$), on a la décomposition spectrale suivante :

$$\hat{A} = \sum_n \alpha_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$$

ce qui permet d'écrire

$$\chi_B\left(\hat{A}\right) = \sum_{n|\alpha_n\in B} |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$$

On peut écrire avantageusement

$$\hat{A} = \sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})} \alpha\Pi^{\hat{A}}_{\{\alpha\}}$$

où $\Pi^{\hat{A}}_{\{\alpha\}}$ est le projecteur orthogonal sur $\ker\left(\hat{A} - \alpha\right)$ de telle sorte que

$$\chi_B\left(\hat{A}\right) = \sum_{\alpha\in\sigma(\hat{A})\cap B} \Pi^{\hat{A}}_{\{\alpha\}}$$

$\chi_B\left(\hat{A}\right)$ est bien un projecteur orthogonal. En effet, on a les relations

$$\chi_B\left(\hat{A}\right) = \chi_B\left(\hat{A}\right)^2 = \chi_B\left(\hat{A}\right)^*$$

Ce nouveau formalisme permet d'écrire très simplement l'espérance et l'écart-type de la mesure A. On a en effet :

$$< A >= \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

et

$$\Delta A = \left(< A^2 > - < A >^2\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\langle\Psi|\hat{A}^2|\Psi\rangle - \langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

On obtient la relation d'incertitude de Heisenberg qui s'énonce ainsi :

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle\Psi|i[\hat{A},\hat{B}]|\Psi\rangle|$$

Exemple 4. *Pour $A = x_j$ et $B = p_j$, on obtient $\Delta x_j \Delta p_j \geq \frac{\hbar}{2}$.*

3 Cinquième et sixième postulats

Deux postulats manquent toujours pour une description complète de la mécanique quantique.

3.1 Évolution temporelle de l'état quantique

Postulat 5 (Évolution de l'état entre deux mesures)**.** *Si le système est isolé, sa dynamique est donnée par*

$$\Psi(t) = \exp\left(-i(t-t_0)\frac{\hat{H}}{\hbar}\right)\Psi(t_0)$$

où $\hat{H}$ est l'hamiltonien du système, autrement dit l'observable associée à l'énergie totale.

Ainsi, bien que le résultat d'une mesure sur une particule quantique soit intrinsèquement probabiliste, on a accès de manière déterministe à la dynamique de la particule.

3.2 Mesure : réduction du paquet d'onde ; obtention d'une valeur unique ; projection de l'état quantique

Postulat 6 (Réduction du paquet d'onde)**.** *Si le résultat de la mesure appartient au Borélien B, et en l'absence de toute autre information, alors l'état du système à l'instant $t_0 + 0$ est*

$$\Psi(t_0+0) = \frac{\chi_B\left(\hat{A}\right)\psi(t_0-0)}{||\chi_B\left(\hat{A}\right)\psi(t_0-0)||}$$

Ce postulat indique en particulier qu'en réalisant deux mesures successives de la même quantité physique, on obtient presque sûrement une valeur identique.

Remarque. *Par contre, si l'on réalise la mesure de la quantité A_1 suivie de la mesure de la quantité A_2, rien ne garantit qu'en mesurant à nouveau A_1 on trouve une valeur identique à la première mesure. Ce n'est vrai que lorsque $\hat{A}_1$ et $\hat{A}_2$ commutent.*

4 Rotations

On s'intéresse à présent à l'effet d'une rotation d'angle θ autour de l'axe $\mathbf{n}$ ($||\mathbf{n}|| = 1$) sur un système. On utilise les représentations du groupe des rotations.

4.1 Champ scalaire

Commençons par le cas d'un champ scalaire p comme le temps, la pression, etc.

On note $R_{\mathbf{n},\theta}$ la rotation d'angle θ autour de l'axe $\mathbf{n}$. En appliquant $R_{\mathbf{n},\theta}$ au système, la quantité $p(\mathbf{r})$ est modifiée comme suit :

$$p(\mathbf{r}) \xrightarrow{R_{\mathbf{n},\theta}} p\left(R^{-1}_{\mathbf{n},\theta}\mathbf{r}\right)$$

On a ici une représentation de spin 0.

4.2 Champ vectoriel

Dans le cas d'un champ vectoriel $\mathbf{v}$ comme une vitesse ou un champ électrique, l'effet de $R_{\mathbf{n},\theta}$ sur le système se traduit par la transformation

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) \xrightarrow{R_{\mathbf{n},\theta}} R_{\mathbf{n},\theta}\mathbf{v}\left(R_{\mathbf{n},\theta}^{-1}\mathbf{r}\right)$$

On a affaire à une représentation de spin 1.

Remarque. *Attention : l'effet de $R_{\mathbf{n},\theta}$ sur un vecteur de $\mathbb{R}^3$ composé de trois champs scalaires ne correspond par à l'effet de $R_{\mathbf{n},\theta}$ sur un champ vectoriel de dimension 3 ! On a notamment*

$$\begin{pmatrix} T(\mathbf{r}) \\ P(\mathbf{r}) \\ \rho(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \xrightarrow{R_{\mathbf{n},\theta}} \begin{pmatrix} T\left(R_{\mathbf{n},\theta}^{-1}\mathbf{r}\right) \\ P\left(R_{\mathbf{n},\theta}^{-1}\mathbf{r}\right) \\ \rho\left(R_{\mathbf{n},\theta}^{-1}\mathbf{r}\right) \end{pmatrix}$$

4.3 Particule de spin $\frac{1}{2}$

On va voir que ces relations ne sont pas vraies pour la fonction d'onde d'une particule quantique. Soit $\Psi \in L^2\left(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}^2\right), ||\Psi|| = 1$.

$$\Psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{R_{\mathbf{n},\theta}} \underbrace{\exp\left(-i\frac{\mathbf{n}\cdot\sigma}{2}\theta\right)}_{\in\mathbb{C}^{2\times 2}} \Psi\left(R_{\mathbf{n},\theta}^{-1}\mathbf{r}\right) = \exp\left(-i\frac{\mathbf{n}\cdot\mathbf{S}}{\hbar}\theta\right)\Psi\left(R_{\mathbf{n},\theta}^{-1}\mathbf{r}\right)$$

où σ est définie par $\forall \mathbf{u} \in \mathbb{R}^3, \mathbf{u}\cdot\sigma = u_x\sigma_x + u_y\sigma_y + u_z\sigma_z$ avec $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ les matrices de Pauli :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

On parle dans ce dernier cas de représentation de spin $\frac{1}{2}$.

Une particule élémentaire peut-être caractérisée par sa masse et son spin.