Cours de Mécanique Quantique

Emmanuel FROMAGER

Les outils mathématiques de la mécanique quantique : produit scalaire, opérateur hermitien, valeur et vecteur propres

I – Espace de Hilbert

- Soit $\mathcal{E}$ un espace vectoriel doté d'un produit scalaire ($\mathcal{E}$ est alors appelé espace de Hilbert) vérifiant les propriétés suivantes : soient $|v\rangle$ et $|w\rangle$ deux vecteurs (ou kets) de $\mathcal{E}$. Leur produit scalaire, que l'on notera $\langle v|w\rangle$ au lieu de $\vec{v}.\vec{w}$, est un nombre complexe tel que

(1) $\langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle^*$ ← algèbre complexe !

et (2) $\langle v|\alpha w\rangle = \alpha\langle v|w\rangle$ où $\alpha\in\mathbb{C}$ ← linéarité à droite

(3) $\langle v|w+t\rangle = \langle v|w\rangle + \langle v|t\rangle$

- Conséquence de (1) et (2) :

$$\langle \alpha v|w\rangle = \langle w|\alpha v\rangle^* = \left(\alpha\langle w|v\rangle\right)^* = \alpha^*\langle w|v\rangle^*$$

soit (4) $\boxed{\langle\alpha v|w\rangle = \alpha^*\langle v|w\rangle}$ ← antilinéarité à gauche

- Conséquence de (1) et (3)

$$\langle w+t|v\rangle = \langle v|t+w\rangle^* = \left(\langle v|t\rangle + \langle v|w\rangle\right)^* = \langle v|t\rangle^* + \langle v|w\rangle^*$$

soit (5) $\boxed{\langle w+t|v\rangle = \langle w|v\rangle + \langle t|v\rangle}$

- On dit que $\{|u_i\rangle\}_{i=1,N}$ est une base orthonormée de $\mathcal{E}$

si $\forall(i,j)\in[1,N]^2$

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij}$$ ← symbole de Kronecker (0 si $i\neq j$ et 1 si $i=j$)

- $\{|u_i\rangle\}_{i=1,N}$ est bien une <u>base</u> car c'est un système de kets linéairement indépendants.

En effet $\sum_{i=1}^{N}\alpha_i|u_i\rangle = 0$

$$\Rightarrow \langle u_j|\sum_{i=1}^{N}\alpha_i u_i\rangle = 0 = \sum_{i=1}^{N}\langle u_j|\alpha_i u_i\rangle$$

j est fixé ici

$$= \sum_{i=1}^{N}\alpha_i\langle u_j|u_i\rangle$$

$$= \alpha_j = 0 \quad \forall j\in[1,N]$$

- Tout ket de $\mathcal{E}$ peut s'écrire dans cette base sous la forme

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i|u_i\rangle \quad \text{où } \forall j\in[1,N]$$

$$\langle u_j|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i\langle u_j|u_i\rangle = c_j$$

soit $|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle u_i|w\rangle |u_i\rangle$

$$\boxed{|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i|w\rangle} \quad (6)$$

- Notion de bra : le bra $\langle w|$ est un opérateur qui associe un nombre, $\langle w|v\rangle$, à tout ket $|v\rangle$

$$\langle w| : \quad \mathcal{E} \longrightarrow \mathbb{C}$$
$$|v\rangle \qquad\qquad \langle w|v\rangle$$

- L'opérateur $|u_i\rangle\langle u_i|$ est un projecteur

$$\hat{P}_i = |u_i\rangle\langle u_i| : \quad \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}$$
$$|v\rangle \qquad \hat{P}_i|v\rangle = |u_i\rangle\langle u_i|v\rangle = \langle u_i|v\rangle|u_i\rangle$$

En effet $(\hat{P}_i)^2 = \hat{P}_i\,\hat{P}_i = (|u_i\rangle\langle u_i|)(|u_i\rangle\langle u_i|)$
$= |u_i\rangle \underbrace{\langle u_i|u_i\rangle}_{1} \langle u_i|$
$= |u_i\rangle\langle u_i| = \hat{P}_i$

- On déduit de (6) : $\forall |w\rangle$,

$$|w\rangle = \hat{\mathbb{1}}|w\rangle = \left(\sum_{i=1}^{N} \hat{P}_i\right)|w\rangle$$

opérateur identité

soit $$\boxed{\sum_{i=1}^{N} \hat{P}_i = \sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i| = \hat{\mathbb{1}}}$$ ← résolution de l'identité

- Représentation du ket $|w\rangle$ en base orthonormée :

$$W = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle u_1|w\rangle \\ \langle u_2|w\rangle \\ \vdots \\ \langle u_N|w\rangle \end{bmatrix}$$

- Produit scalaire en base orthonormée :

si $|v\rangle = \sum_{i=1}^{N} D_i|u_i\rangle$

$$\langle v|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle D_i u_i|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} D_i^* \underbrace{\langle u_i|w\rangle}_{c_i}$$

$$V = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_N \end{bmatrix}$$ ← représentation du ket $|v\rangle$ dans la base $\{|u_i\rangle\}_{i=1,N}$

Notation : $V^\dagger = \underbrace{(V^T)^*}_{\text{"trans-conjugué de } V\text{"}} = [D_1^* \; D_2^* \; \ldots\ldots \; D_N^*]$

Ainsi $$\boxed{\langle v|w\rangle = V^\dagger W}$$

- Norme : $\langle w|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} c_i^* c_i = \sum_{i=1}^{N} |c_i|^2 = \|w\|^2 = W^\dagger W$

définition

- Représentation d'un opérateur en base orthonormée :

$$\forall j \in [1,N] \qquad \hat{A}|u_j\rangle = \sum_{i=1}^{N} A_{ij}|u_i\rangle$$

$$[\hat{A}] = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & & A_{2N} \\ A_{31} & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & \cdots & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix} \longleftarrow$$ représentation matricielle de $\hat{A}$ dans la base $\{|u_i\rangle\}_{i=1,N}$

or $\forall k \in [1,N]$,
$$\langle u_k|\hat{A}|u_j\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle u_k|A_{ij}u_i\rangle$$
$$= \sum_{i=1}^{N} A_{ij}\underbrace{\langle u_k|u_i\rangle}_{\delta_{ki}}$$
$$= A_{kj}$$

soit $$\boxed{A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle}$$

À noter que $\hat{A}$ peut s'écrire sous la forme

$$\hat{A} = \hat{\mathbb{1}}\hat{A}\hat{\mathbb{1}} = \left(\sum_{i=1}^{N}|u_i\rangle\langle u_i|\right)\hat{A}\left(\sum_{j=1}^{N}|u_j\rangle\langle u_j|\right)$$

résolution de l'identité

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{N}|u_i\rangle\underbrace{\langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle}_{A_{ij}}\langle u_j|$$

signifie $\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}$

soit $$\boxed{\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{N} A_{ij}|u_i\rangle\langle u_j|} \quad (7)$$

II _ Opérateur hermitien

- Définition de l'opérateur adjoint $\hat{A}^+$ de $\hat{A}$:

$$\forall (|w\rangle,|v\rangle) \in \mathcal{E}^2$$

$$\langle \underbrace{w|}_{\text{bra}}\underbrace{\hat{A}|v\rangle}_{\text{ket}} = \langle \underbrace{\hat{A}^+w}_{\text{bra}}|\underbrace{v\rangle}_{\text{ket}} = \left(\langle \underbrace{v|}_{\text{bra}}\underbrace{\hat{A}^+|w\rangle}_{\text{ket}}\right)^*$$

- Représentation matricielle de $\hat{A}^+$ en base orthonormée :

$$[\hat{A}]_{ij} = A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$$

$$[\hat{A}^+]_{ij} = \langle u_i|\hat{A}^+|u_j\rangle = \langle \hat{A}u_i|u_j\rangle$$
$$= \left(\underbrace{\langle u_j|\hat{A}|u_i\rangle}_{A_{ji}}\right)^*$$

soit $$[\hat{A}^+]_{ij} = A_{ji}^*$$

$$[\hat{A}^+] = \underbrace{\left([\hat{A}]^T\right)^*}_{\text{"trans-conjugué de } [\hat{A}]\text{"}}$$

- Lorsqu'un opérateur est égal à son opérateur adjoint, on dit qu'il est auto-adjoint ou hermitique ou hermitien :

$$\boxed{\hat{A}^+ = \hat{A}}$$

- Théorème important : $\boxed{\text{les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles}}$ (Th1)

En effet, si $|a\rangle$ est vecteur propre de $\hat{A}$ associé à la valeur propre a

alors $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle \Rightarrow \langle a|\hat{A}|a\rangle = a \langle a|a\rangle$

soit $a = \dfrac{\langle a|\hat{A}|a\rangle}{\langle a|a\rangle}$

Le complexe conjugué de a est donc égal à

car $\hat{A} = \hat{A}^+$

$$a^* = \frac{\langle a|\hat{A}|a\rangle^*}{\langle a|a\rangle^*} = \frac{\langle \hat{A}a|a\rangle}{\langle a|a\rangle} = \frac{\langle \hat{A}^+a|a\rangle}{\langle a|a\rangle} = \frac{\langle a|\hat{A}|a\rangle}{\langle a|a\rangle}$$

soit $a^* = a$ ⟵ a est bien un nombre réel

- Autre théorème important : Etant donné un opérateur hermitien $\hat{A}$ de l'espace d'Hilbert $\mathcal{E}$, il existe une base orthonormée de $\mathcal{E}$ composée uniquement de vecteurs propres $|a_i\rangle$ de $\hat{A}$ associés à la valeur propre a_i

$$\forall i \in [1,N] \qquad \hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$$

- Dans cette base, l'opérateur $\hat{A}$ est donc représenté par la matrice diagonale

$$[\hat{A}] = \begin{bmatrix} a_1 & & & 0 \\ & a_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_N \end{bmatrix}$$

Exercice : Soit un opérateur $\hat{O}$ dont la représentation matricielle en base orthonormée s'écrit

$$[\hat{O}] = \begin{bmatrix} \alpha & \gamma^* \\ \gamma & \beta \end{bmatrix} \quad \text{où } (\alpha,\beta) \in \mathbb{R}^2 \text{ et } \gamma \in \mathbb{C}$$

1. Montrer que $\hat{O}$ est hermitien (soit $[\hat{O}^+] = [\hat{O}]$)
2. Déterminer les valeurs propres de $\hat{O}$ et les vecteurs propres associés.

- Résultat important : Deux vecteurs propres de $\hat{A}$ associés à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux

En effet si $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ et $\hat{A}|b\rangle = b|b\rangle$ avec $a \neq b$ alors

$$\langle a|\hat{A}|b\rangle = b\langle a|b\rangle = \langle \hat{A}a|b\rangle = a^*\langle a|b\rangle$$

car $\hat{A}^+ = \hat{A}$

$a^* = a$ ⟵ d'après le théorème (Th1)

donc $\underbrace{(b-a)}_{\neq 0}\underbrace{\langle a|b\rangle}_{=0} = 0$

- Décomposition spectrale d'un opérateur hermitien.

en choisissant comme base, dans l'Eq. (7), la base $\{|a_i\rangle\}_{i=1,N}$ des vecteurs propres de $\hat{A}$ on obtient

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^{N} A_{ij} |a_i\rangle\langle a_j| \quad \text{où} \quad A_{ij} = \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle = a_j \underbrace{\langle a_i|a_j\rangle}_{\delta_{ij}}$$

δ_{ij} ← base orthonormée !

soit
$$\boxed{\hat{A} = \sum_{i=1}^{N} \underbrace{a_i}_{\text{valeur propre}} \underbrace{|a_i\rangle}_{\text{ket propre}}\langle a_i|} \quad (8)$$

- Notion de dégénérescence : il peut arriver que plusieurs vecteurs (ou kets) propres soient associés à la même valeur propre α. L'ensemble des vecteurs propres $\{|a_i\rangle\}_{i=1,M}$ correspondant $\mathcal{E}_\alpha$ est appelé espace propre associé à α :

$$\forall i \in [1,M] \qquad \hat{A}|a_i\rangle = \alpha|a_i\rangle \quad \text{où} \quad M \leq N$$

On dira que α est "M fois dégénéré". Tout vecteur de $\mathcal{E}_\alpha$ est vecteur propre de $\hat{A}$ associé à α. En effet, $\forall |w\rangle \in \mathcal{E}_\alpha$

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{M} c_i |a_i\rangle \Rightarrow \hat{A}|w\rangle = \sum_{i=1}^{M} c_i \underbrace{\hat{A}|a_i\rangle}_{\alpha|a_i\rangle} = \alpha \sum_{i=1}^{M} c_i|a_i\rangle$$

soit $\hat{A}|w\rangle = \alpha|w\rangle$

III _ Postulat de la mécanique quantique sur les observables

- Un opérateur hermitien a des propriétés mathématiques qui permettent d'établir un lien entre théorie et expérience. En effet, si l'on pense à l'énergie, elle est obtenue en mécanique quantique en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$$

- Si l'opérateur $\hat{H}$ est hermitien, nous savons que

(1) l'équation de Schrödinger pourra être résolue dans l'espace des états quantiques et le nombre de solutions correspond à la dimension de l'espace des états quantiques

(2) les valeurs propres de $\hat{H}$, i.e. les énergies possibles du système quantique considéré, seront des nombres réels et donc assimilables à des quantités mesurables (que l'on appelle "observables"), s'agissant ici de l'énergie.

- Plus généralement, on postule qu'il existe, pour une observable donnée, un opérateur hermitien associé $\hat{A}$. Supposons dans un premier temps que ses valeurs propres ne sont pas dégénérées

Tout état quantique $|\varphi\rangle$ peut se décomposer dans la base orthonormée $\{|a_i\rangle\}_{i=1,N}$ des vecteurs propres de $\hat{A}$:

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle\langle a_i|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle a_i|\varphi\rangle\,|a_i\rangle$$

- Si, au moment de la mesure, l'observable a pour valeur a_i, on dira que, juste après la mesure, le système quantique est dans l'état $|a_i\rangle$
- Si le système est dans l'état $|\varphi\rangle$ avant la mesure, on interprètera $|\langle a_i|\varphi\rangle|^2 = \mathcal{P}_i$ comme la <u>probabilité</u> de mesurer a_i.

⚠ Condition de normalisation : pour interpréter $\mathcal{P}_i$ comme une probabilité il faut que

$$\sum_{i=1}^{N} \mathcal{P}_i = 1$$

on postule que les seules valeurs mesurables sont les valeurs propres de $\hat{A}$.

soit $$\sum_{i=1}^{N} |\langle a_i|\varphi\rangle|^2 = \sum_{i=1}^{N} \langle a_i|\varphi\rangle^* \langle a_i|\varphi\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \langle\varphi|a_i\rangle\langle a_i|\varphi\rangle$$

$$= \langle\varphi|\underbrace{\left(\sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle\langle a_i|\right)}_{\hat{\mathbb{1}}}|\varphi\rangle$$

$\hat{\mathbb{1}}$ ← résolution de l'identité

donc $$\boxed{\langle\varphi|\varphi\rangle = 1}$$

La valeur moyenne de l'observable $\langle A\rangle$ s'écrit alors

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i \mathcal{P}_i = \sum_{i=1}^{N} a_i |\langle a_i|\varphi\rangle|^2$$

$$\langle A\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i \langle a_i|\varphi\rangle^* \langle a_i|\varphi\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{N} a_i \langle\varphi|a_i\rangle\langle a_i|\varphi\rangle$$

$$= \langle\varphi|\underbrace{\left(\sum_{i=1}^{N} a_i |a_i\rangle\langle a_i|\right)}_{=\hat{A}\text{ d'après l'équation (8)}}|\varphi\rangle$$

soit $$\boxed{\langle A\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle}$$

- L'acte de mesure consiste donc à projeter l'état quantique $|\varphi\rangle$ sur un des vecteurs propre de $\hat{A}$

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \langle a_i|\varphi\rangle |a_i\rangle \longrightarrow |a_j\rangle$$

puis à appliquer l'opérateur $\hat{A}$

$$\hat{A}|a_j\rangle = \underbrace{a_j}_{\text{valeur mesurée.}}|a_j\rangle$$

- Cas où une valeur propre α est M fois dégénérée :

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{M} \langle a_i|\varphi\rangle |a_i\rangle + \sum_{i=M+1}^{N} \langle a_i|\varphi\rangle |a_i\rangle$$

où $\hat{A}|a_i\rangle = \alpha |a_i\rangle \quad \forall i \in [1, M]$

et $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$

La probabilité de mesurer α sera alors

$$\mathcal{P}(\alpha) = \underbrace{\sum_{i=1}^{M} \mathcal{P}_i}_{\text{Somme sur tous les états propres associés à } \alpha} = \sum_{i=1}^{M} |\langle a_i|\varphi\rangle|^2$$

Si α est mesuré, l'état quantique juste après la mesure sera la projection de $|\varphi\rangle$ sur l'espace propre associé à α soit $\sum_{i=1}^{M} |a_i\rangle\langle a_i|\varphi\rangle$

IV - Commutateur

- Soient deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$ (ils ne sont pas nécessairement hermitiens). Leur commutateur, noté $[\hat{A}, \hat{B}]$, est un opérateur défini comme suit :

$$[\hat{A}, \hat{B}] : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{E}$$

$$|w\rangle \longrightarrow [\hat{A}, \hat{B}]|w\rangle = \hat{A}(\hat{B}|w\rangle) - \hat{B}(\hat{A}|w\rangle) = \hat{A}\hat{B}|w\rangle - \hat{B}\hat{A}|w\rangle$$

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

- On dit que deux opérateurs commutent lorsque leur commutateur est nul

- Supposons qu'il existe une base orthonormée commune $\{|u_i\rangle\}_{i=1,N}$ de vecteurs propres de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ← on les suppose hermitiens dans la suite

$\forall i \in [1, N]$ $\quad \hat{A}|u_i\rangle = a_i|u_i\rangle$

$\quad \hat{B}|u_i\rangle = b_i|u_i\rangle$

Dans ce cas, $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent. En effet, $\forall |w\rangle \in \mathcal{E}$

$$|w\rangle = \sum_{i=1}^{N} |u_i\rangle\langle u_i|w\rangle \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}]|w\rangle = \hat{A}\hat{B}|w\rangle - \hat{B}\hat{A}|w\rangle$$

soit $[\hat{A},\hat{B}]|w\rangle = \hat{A}\left(\sum_{i=1}^{N} \langle u_i|w\rangle \underbrace{\hat{B}|u_i\rangle}_{b_i|u_i\rangle}\right) - \hat{B}\left(\sum_{i=1}^{N} \langle u_i|w\rangle \underbrace{\hat{A}|u_i\rangle}_{a_i|u_i\rangle}\right)$

$$= \sum_{i=1}^{N} b_i \langle u_i|w\rangle \underbrace{\hat{A}|u_i\rangle}_{a_i|u_i\rangle} - \sum_{i=1}^{N} a_i \langle u_i|w\rangle \underbrace{\hat{B}|u_i\rangle}_{b_i|u_i\rangle}$$

$$= \sum_{i=1}^{N} \underbrace{\left[b_i a_i \langle u_i|w\rangle|u_i\rangle - b_i a_i \langle u_i|w\rangle|u_i\rangle\right]}_{0}$$

$\Rightarrow \quad [\hat{A},\hat{B}] = 0$

- Théorème important : la réciproque est vraie. Autrement dit, si deux opérateurs hermitiens commutent alors il existe un base orthonormée commune de vecteurs propres. La mesure de l'observable A ayant pour effet de projeter l'état quantique sur un des états propres $|u_i\rangle$ de $\hat{A}$, il est alors possible de mesurer simultanément A et B puisque $|u_i\rangle$ est également état propre de $\hat{B}$. La mesure simultanée de deux observables est donc conditionnée par la valeur du commutateur des deux opérateurs hermitiens associés. Le paragraphe suivant l'exprime de façon plus mathématique.

V_ Relations d'incertitude

- Soit A une observable et $\hat{A}$ l'opérateur hermitien associé. L'écart type, noté ΔA, est défini pour un état quantique $|\varphi\rangle$ quelconque comme suit

$$\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle} \longleftarrow \text{écart à la moyenne}$$

avec $\langle (\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle = \langle\varphi|(\hat{A} - \langle A\rangle\hat{\mathbb{1}})^2|\varphi\rangle$,

$\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$ et $\langle A\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$.

Comme $(\hat{A} - \langle A\rangle\hat{\mathbb{1}})^2 = (\hat{A})^2 - 2\langle A\rangle\hat{A} + \langle A\rangle^2\hat{\mathbb{1}}$

il vient

$$(\Delta A)^2 = \underbrace{\langle\varphi|\hat{A}^2|\varphi\rangle}_{\langle A^2\rangle} - 2\langle A\rangle\underbrace{\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle}_{\langle A\rangle} + \langle A\rangle^2\underbrace{\langle\varphi|\varphi\rangle}_{1}$$

soit $\boxed{(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2} \longleftarrow$ formule usuelle

<u>Exercice</u> : montrer que la quantité $\langle(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle$ est bien positive et donc que ΔA est bien défini, et ce en utilisant l'hermiticité de $\hat{A}$.

- Si $|\varphi\rangle$ est un des états propres $|a_i\rangle$ de $\hat{A}$ associé à la valeur propre a_i alors $|\varphi\rangle = |a_i\rangle$ et

$$\hat{A}^2|\varphi\rangle = \hat{A}^2|a_i\rangle = \hat{A}(\underbrace{\hat{A}|a_i\rangle}_{a_i|a_i\rangle}) = a_i\hat{A}|a_i\rangle$$

soit $\hat{A}^2|\varphi\rangle = a_i^2|a_i\rangle = a_i^2|\varphi\rangle$

$$\Rightarrow \quad \langle A^2\rangle = \langle\varphi|\hat{A}^2|\varphi\rangle = a_i^2\langle\varphi|\varphi\rangle = a_i^2$$

$$\text{et} \quad \langle A\rangle^2 = (\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle)^2 = (\underbrace{\langle a_i|\hat{A}|a_i\rangle}_{a_i\underbrace{\langle a_i|a_i\rangle}_{1}})^2 = a_i^2$$

1 ← base orthonormée !

de sorte que $\Delta A = 0$ ← pour un état propre de $\hat{A}$

- Supposons maintenant que $|\varphi\rangle$ n'est pas vecteur propre de $\hat{A}$, par exemple $|\varphi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}(|a_i\rangle + \delta|a_j\rangle)$ où $\delta \in \mathbb{R}^*$

i est différent de j dans cette expression !

et $a_i \neq a_j$. On rappelle que $\begin{cases}\langle a_i|a_j\rangle = 0 \\ \langle a_i|a_i\rangle = 1 = \langle a_j|a_j\rangle\end{cases}$

a_i : valeur propre associé à $|a_i\rangle$; a_j : valeur propre associé à $|a_j\rangle$

On vérifie tout d'abord que $|\varphi\rangle$ est normé :

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\Big(\underbrace{\langle\varphi|a_i\rangle}_{\langle a_i|\varphi\rangle^* = (1/\sqrt{1+\delta^2})} + \delta\underbrace{\langle\varphi|a_j\rangle}_{\langle a_j|\varphi\rangle^* = \delta/\sqrt{1+\delta^2}}\Big)$$

soit $\langle\varphi|\varphi\rangle = \dfrac{1}{(1+\delta^2)}\left[1+\delta^2\right] = 1$ ok !

$$\hat{A}|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\left(\hat{A}|a_i\rangle + \delta\hat{A}|a_j\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\left(a_i|a_i\rangle + \delta a_j|a_j\rangle\right) \quad (9)$$

$$\Rightarrow \langle A\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\left(a_i\langle\varphi|a_i\rangle + \delta a_j\langle\varphi|a_j\rangle\right)$$

soit $\langle A\rangle = \dfrac{1}{(1+\delta^2)}\left[a_i + \delta^2 a_j\right]$

$$\boxed{\langle A\rangle^2 = \frac{1}{(1+\delta^2)^2}\left(a_i^2 + \delta^4 a_j^2 + 2\delta^2 a_i a_j\right)}$$

De plus, d'après l'Eq. (9),

$$\hat{A}^2|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\left(a_i\hat{A}|a_i\rangle + \delta a_j\hat{A}|a_j\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}\left(a_i^2|a_i\rangle + \delta a_j^2|a_j\rangle\right)$$

de sorte que $\langle A^2 \rangle = \langle \varphi | \hat{A}^2 | \varphi \rangle = \frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}} \left(a_i^2 \underbrace{\langle \varphi | a_i \rangle}_{\frac{1}{\sqrt{1+\delta^2}}} + \delta a_j^2 \underbrace{\langle \varphi | a_j \rangle}_{\frac{\delta}{\sqrt{1+\delta^2}}} \right)$

soit $\langle A^2 \rangle = \frac{1}{(1+\delta^2)} \left[a_i^2 + \delta^2 a_j^2 \right]$

$$\Rightarrow (\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{1}{(1+\delta^2)^2} \left[(a_i^2 + \delta^2 a_j^2)(1+\delta^2) - a_i^2 - \delta^4 a_j^2 - 2\delta^2 a_i a_j \right]$$

$$= \frac{1}{(1+\delta^2)^2} \left[\cancel{a_i^2} + \delta^2 a_j^2 + \delta^2 a_i^2 + \cancel{\delta^4 a_j^2} - \cancel{a_i^2} - \cancel{\delta^4 a_j^2} - 2\delta^2 a_i a_j \right]$$

$$= \frac{\delta^2}{(1+\delta^2)^2} (a_j - a_i)^2$$

$$\Rightarrow \boxed{\Delta A = \frac{|\delta| |a_j - a_i|}{(1+\delta^2)}}$$

Comme $a_j \neq a_i$ et $\delta \neq 0$ l'écart type est non nul.

C'est l'outil mathématique permettant de savoir si, avant la mesure, le système est dans un état propre ou non de l'opérateur $\hat{A}$, et donc s'il y a une incertitude (avant mesure) sur la valeur de l'observable

- Soient deux observables A et B. Quelque soit l'état quantique $|\varphi\rangle$, la relation d'incertitude suivante est vérifiée :

$$\boxed{\Delta A \, \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A,B] \rangle|} \quad (10)$$

où $\langle [A,B] \rangle = \langle \varphi | [\hat{A}, \hat{B}] | \varphi \rangle$
et $\langle \varphi | \varphi \rangle = 1$

Conséquence importante : Si les deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$, associés respectivement aux observables A et B, ne commutent pas, la quantité $\langle [A,B] \rangle$ peut être non nulle de sorte qu'il est impossible, dans l'état quantique $|\varphi\rangle$, d'avoir une incertitude nulle sur la valeur de A ET de B. En d'autres termes, il est impossible de mesurer simultanément A ET B. En effet, être dans un état propre commun à $\hat{A}$ et $\hat{B}$ signifierait $\Delta A = 0$ et $\Delta B = 0$

soit $\Delta A \Delta B = 0 \longleftarrow$ impossible si $\frac{1}{2} |\langle [A,B] \rangle| > 0$

Preuve de la relation (10) :

Soient les opérateurs $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle = \hat{A} - \langle \varphi | \hat{A} | \varphi \rangle$
$\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B \rangle = \hat{B} - \langle \varphi | \hat{B} | \varphi \rangle$

et $|\psi(x)\rangle = (\Delta\hat{B} + i x \Delta\hat{A}) |\varphi\rangle$ le ket dépendant de la variable réelle x.

Formules utiles :

① $\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle$

$$\langle \hat{A}\psi|\varphi\rangle = \langle \varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle \hat{A}^+\varphi|\psi\rangle^* = \langle \psi|\hat{A}^+|\varphi\rangle$$

soit $\boxed{(\hat{A}^+)^+ = \hat{A}}$ ← cette formule est valable pour n'importe quel opérateur (pas nécessairement hermitien !)

② $\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle, \ \forall \alpha \in \mathbb{C}$

$$\langle \psi|\alpha\hat{A}|\varphi\rangle = \alpha\langle \psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \langle \alpha^*\psi|\hat{A}|\varphi\rangle = \langle \alpha^*\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle$$

soit $\boxed{(\alpha\hat{A})^+ = \alpha^*\hat{A}^+}$

③ $\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle$

$$\langle \psi|(\hat{A}+\hat{B})|\varphi\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\varphi\rangle + \langle \psi|\hat{B}|\varphi\rangle = \langle \hat{A}^+\psi|\varphi\rangle + \langle \hat{B}^+\psi|\varphi\rangle = \langle (\hat{A}^+ + \hat{B}^+)\psi|\varphi\rangle$$

Soit $\boxed{(\hat{A}+\hat{B})^+ = \hat{A}^+ + \hat{B}^+}$

④ $\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle$

$$\langle \psi|\hat{A}\hat{B}|\varphi\rangle = \langle \hat{A}^+\psi|\hat{B}|\varphi\rangle = \langle \hat{B}^+\hat{A}^+\psi|\varphi\rangle$$

Soit $\boxed{(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+}$

En utilisant ces formules, on peut calculer la norme au carré de $|\psi(x)\rangle$,

$$\begin{aligned} N(x) = \langle \psi(x)|\psi(x)\rangle &= \langle (\Delta\hat{B} + ix\Delta\hat{A})\varphi|\psi(x)\rangle \\ &= \langle \varphi|(\Delta\hat{B}+ix\Delta\hat{A})^+|\psi(x)\rangle \\ &= \langle \varphi|(\Delta\hat{B})^+ + (ix\Delta\hat{A})^+|\psi(x)\rangle \\ &= \langle \varphi|(\Delta\hat{B})^+ - ix(\Delta\hat{A})^+|\psi(x)\rangle \end{aligned}$$

où $(\Delta\hat{B})^+ = \hat{B}^+ - (\langle B\rangle \mathbb{1})^+ = \hat{B} - \langle B\rangle^*$

$\hat{B}$ est hermitien ici

or $\langle B\rangle^* = \langle \varphi|\hat{B}|\varphi\rangle^* = \langle \hat{B}\varphi|\varphi\rangle = \langle \varphi|\hat{B}^+|\varphi\rangle = \langle \varphi|\hat{B}|\varphi\rangle = \langle B\rangle$

Soit $(\Delta\hat{B})^+ = \hat{B} - \langle B\rangle = \Delta\hat{B}$ et, de même,

$(\Delta\hat{A})^+ = \hat{A} - \langle A\rangle = \Delta\hat{A}$

Ainsi
$$\begin{aligned} N(x) &= \langle \varphi|(\Delta\hat{B} - ix\Delta\hat{A})(\Delta\hat{B}+ix\Delta\hat{A})|\varphi\rangle \\ &= \underbrace{\langle \varphi|(\Delta\hat{B})^2|\varphi\rangle}_{(\Delta B)^2 \text{ (par définition)}} + ix\langle \varphi|\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\varphi\rangle - ix\langle \varphi|\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}|\varphi\rangle + x^2\underbrace{\langle \varphi|(\Delta\hat{A})^2|\varphi\rangle}_{(\Delta A)^2 \text{ (par définition)}} \end{aligned}$$

Soit $\boxed{N(x) = (\Delta A)^2x^2 + (\Delta B)^2 + ix\langle \varphi|[\Delta\hat{B}, \Delta\hat{A}]|\varphi\rangle}$

Formules utiles:

① $[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}] = \hat{A}(\hat{B}+\hat{C}) - (\hat{B}+\hat{C})\hat{A}$
$= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}$

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

② $\forall \alpha \in \mathbb{C}$

$[\hat{A},\alpha\hat{B}] = \alpha\hat{A}\hat{B} - \alpha\hat{B}\hat{A} = \alpha(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$

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

③ $[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = -[\hat{C},\hat{A}+\hat{B}] = -([\hat{C},\hat{A}] + [\hat{C},\hat{B}])$
$= -[\hat{C},\hat{A}] - [\hat{C},\hat{B}]$

soit $\boxed{[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}]}$

④ $\forall \alpha \in \mathbb{C}$ $[\alpha\hat{A},\hat{B}] = -[\hat{B},\alpha\hat{A}] = -\alpha[\hat{B},\hat{A}]$

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

En utilisant ces formules il vient

$$[\Delta\hat{B},\Delta\hat{A}] = [\hat{B} - \langle B\rangle\hat{\mathbb{1}}, \hat{A} - \langle A\rangle\hat{\mathbb{1}}]$$
$$= [\hat{B},\hat{A} - \langle A\rangle\hat{\mathbb{1}}] - \langle B\rangle\underbrace{[\hat{\mathbb{1}},\hat{A} - \langle A\rangle\hat{\mathbb{1}}]}_{0}$$
$$= [\hat{B},\hat{A}] - \langle A\rangle\underbrace{[\hat{B},\hat{\mathbb{1}}]}_{0}$$

de sorte que

$$N(x) = (\Delta A)^2x^2 + (\Delta B)^2 + ix\underbrace{\langle\varphi|[\hat{B},\hat{A}]|\varphi\rangle}_{\langle[B,A]\rangle}$$

$\langle[B,A]\rangle = -\langle\varphi|[\hat{A},\hat{B}]|\varphi\rangle = -\langle[A,B]\rangle$

polynôme de degré 2
dont le discriminant vaut

$$\Delta = \underbrace{\left|(-i\langle[A,B]\rangle)\right|^2}\ - 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \leq 0 \qquad (11)$$

pour que $N(x)$ soit positif ou nul

Commentaire: $-i\langle[A,B]\rangle$ est bien un nombre réel.
En effet

$$(-i\langle[A,B]\rangle)^* = (-i\langle\varphi|\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}|\varphi\rangle)^*$$
$$= +i[\langle\varphi|\hat{A}\hat{B}|\varphi\rangle^* - \langle\varphi|\hat{B}\hat{A}|\varphi\rangle^*]$$
$$= i(\langle\hat{A}\hat{B}\varphi|\varphi\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\varphi|\varphi\rangle)$$
$$= i[\langle\varphi|\underbrace{(\hat{A}\hat{B})^+}_{\hat{B}^+\hat{A}^+ = \hat{B}\hat{A}}|\varphi\rangle - \langle\varphi|\underbrace{(\hat{B}\hat{A})^+}_{\hat{A}^+\hat{B}^+ = \hat{A}\hat{B}}|\varphi\rangle]$$

puisque $\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont hermitiens

donc

$$(-i\langle[A,B]\rangle)^* = i\langle\varphi|\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B}|\varphi\rangle$$
$$= -i\langle\varphi|\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}|\varphi\rangle$$
$$= -i\langle\varphi|[\hat{A},\hat{B}]|\varphi\rangle = -i\langle[A,B]\rangle$$

D'après (11)

$$|\langle [A,B]\rangle|^2 \leq 4(\Delta A)^2(\Delta B)^2$$

soit $|\langle [A,B]\rangle| \leq 2(\Delta A)(\Delta B)$

ou $\boxed{\Delta A\, \Delta B \geqslant \frac{1}{2}|\langle [A,B]\rangle|}$ (12)

VI - Applications : cas de la particule

- L'espace des états est celui de la théorie de Schrödinger $\mathcal{E}_S = \{|\vec{r}\rangle\}_{\vec{r}\in R^3}$

- Base orthonormée :

$$\langle \vec{r}\,'|\vec{r}\rangle = \delta(\vec{r}\,'-\vec{r})$$ ← distribution de Dirac (généralisation du symbole de Kronecker)

Définition : soit $f(\vec{r})$ une fonction de $\mathbb{R}^3$ dans $\mathbb{C}$

$$\int_{R^3} d\vec{r}\, f(\vec{r})\,\delta(\vec{r}\,'-\vec{r}) = f(\vec{r}\,')$$

- $$|\varphi\rangle = \int_{R^3} d\vec{r}\; \varphi(\vec{r})\,|\vec{r}\rangle$$

$\forall \vec{r}\,' \in \mathbb{R}^3$, $$\langle \vec{r}\,'|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \varphi(\vec{r})\,\langle \vec{r}\,'|\vec{r}\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \varphi(\vec{r})\;\delta(\vec{r}\,'-\vec{r})$$

soit $\langle \vec{r}\,'|\varphi\rangle = \varphi(\vec{r}\,')$

- $$\langle\varphi|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \varphi(\vec{r})\; \underbrace{\langle\varphi|\vec{r}\rangle}_{\varphi^*(\vec{r})}$$

La condition de normalisation $\int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; |\varphi(\vec{r})|^2$ s'écrit donc simplement

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$$

- Définition : soit $|\vec{r}_0\rangle = |x_0, y_0, z_0\rangle$ le ket "position $\vec{r}_0$". On définit les opérateurs position $\hat{x}$, $\hat{y}$ et $\hat{z}$ comme suit

$$\left.\begin{aligned} \hat{x}\,|\vec{r}_0\rangle &= x_0\,|\vec{r}_0\rangle \\ \hat{y}\,|\vec{r}_0\rangle &= y_0\,|\vec{r}_0\rangle \\ \hat{z}\,|\vec{r}_0\rangle &= z_0\,|\vec{r}_0\rangle \end{aligned}\right\}$$

$\forall\, |\varphi\rangle \in \mathcal{E}_S$ $$|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \varphi(\vec{r})\,|\vec{r}\rangle$$

de sorte que $$\hat{x}\,|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; \varphi(\vec{r})\,\underbrace{\hat{x}\,|\vec{r}\rangle}_{x\,|\vec{r}\rangle}$$

$$\hat{x}\,|\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; x\,\varphi(\vec{r})\,|\vec{r}\rangle$$

- Valeur moyenne de la position :

$$\langle x\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; x\,|\varphi(\vec{r})|^2 = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\; x\,\underbrace{\langle\vec{r}|\varphi\rangle}_{\varphi(\vec{r})}\underbrace{\langle\varphi|\vec{r}\rangle}_{\varphi^*(\vec{r})}$$

définition que nous avions donnée

Calculons maintenant

$$\langle \varphi | \hat{x} | \varphi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r} \langle \varphi | \hat{x} | \vec{r} \rangle \varphi(\vec{r}) = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \varphi(\vec{r})\, x \underbrace{\langle \varphi | \vec{r} \rangle}_{\varphi^*(\vec{r})}$$

Ainsi $\boxed{\langle x \rangle = \langle \varphi | \hat{x} | \varphi \rangle}$

• Autre définition : les composantes de l'opérateur impulsion $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ sont définies comme suit

$\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{E}_s$

$$\hat{p}_x |\varphi\rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \frac{\partial \varphi}{\partial x}(\vec{r})\, |\vec{r}\rangle$$

$$\hat{p}_y |\varphi\rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial y}\, |\vec{r}\rangle$$

$$\hat{p}_z |\varphi\rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial z}\, |\vec{r}\rangle$$

Ainsi $$\langle \varphi | \hat{p}_x | \varphi \rangle = -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \frac{\partial \varphi}{\partial x}(\vec{r}) \underbrace{\langle \varphi | \vec{r} \rangle}_{\varphi^*(\vec{r})}$$

$$= \langle p_x \rangle$$

d'après la définition que nous avions donnée.

• Relation d'incertitude d'Heisenberg.

$$\forall |\varphi\rangle \in \mathcal{E}_s, \quad |\varphi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \varphi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] |\varphi\rangle = \hat{x}\hat{p}_x |\varphi\rangle - \hat{p}_x \hat{x} |\varphi\rangle$$

$$= \hat{x}\left(-i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x} |\vec{r}\rangle \right)$$

$$- \hat{p}_x \left(\int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, x\, \varphi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle \right)$$

$$= -i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r} \left(\frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x} \right) x |\vec{r}\rangle$$

$$+ i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left[x \varphi(\vec{r}) \right]}_{\varphi(\vec{r}) + x \frac{\partial \varphi(\vec{r})}{\partial x}} |\vec{r}\rangle$$

Soit $[\hat{x}, \hat{p}_x] |\varphi\rangle = i\hbar \int_{\mathbb{R}^3} d\vec{r}\, \varphi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle = + i\hbar |\varphi\rangle$

$\Rightarrow$ $\boxed{[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar}$

ainsi, d'après l'Eq. (12), $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2} | \langle [x, p_x] \rangle |$

où $\langle [x, p_x] \rangle = \langle \varphi | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \varphi \rangle = i\hbar$

soit $\boxed{\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}}$