chapitre 3 : Les postulats de la mécanique quantique

I) Enoncé des postulats

1) Postulat 1 : Etat d'un système

L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la donnée d'un ket $|\psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états $\mathcal{E}$.

$|\psi(t)\rangle$: est appelé vecteur d'état.

2) Postulat 2 : Description d'une grandeur physique

A toute grandeur physique mesurable $\mathcal{A}$, on peut faire correspondre un opérateur A qui agit sur les vecteurs d'état de l'espace $\mathcal{E}$.

Cet opérateur est une observable.

<u>Exemples</u> :

- à l'impulsion classique $\vec{p}$, on fait correspondre l'opérateur $-i\hbar\vec{\nabla}$
- à l'énergie, on fait correspondre l'opérateur hamiltonien.

3) Postulat 3 : Mesure d'une grandeur physique.

La mesure d'une grandeur physique $\mathcal{A}$ ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de l'observable A correspondante.

<u>Résultat</u> : Puisque A est une observable (A est hermitique), la mesure donnera toujours une valeur réelle.

– Les probabilités

Lorsqu'on mesure la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur un système dans l'état $|\psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre non-dégénérée a_n de l'observable $\mathcal{A}$ correspondante est :

$$\mathcal{P}(a_n) = \frac{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

où P_n : est le projecteur sur le sous-espace associé à la valeur propre a_n.

avec :

$P_n = |u_n\rangle\langle u_n|$: si a_n est non-dégénérée (simple)

$P_n = \sum_{k=1}^{g_n} |u_{n,k}\rangle\langle u_{n,k}|$: si " " dégénérée.

$|u_n\rangle$: étant le vecteur propre associé à la valeur propre a_n

g_n : est le degré de dégénérescence de la valeur propre a_n.

4) Postulat 4 : (a) Soit $\mathcal{A}$ une grandeur physique d'un système quantique et A l'observable correspondante dont le spectre ne comporte que des valeurs propres non dégénérées a_n associées aux vecteurs propres orthonormés $|u_n\rangle$. Lorsqu'on mesure $\mathcal{A}$ sur le système dans l'état normé $|\psi\rangle$, la probabilité $\mathcal{P}(a_n)$ d'obtenir comme résultat de mesure a_n est :

$$\mathcal{P}(a_n) = \langle \psi | P_n | \psi \rangle = \langle \psi | u_n \rangle\langle u_n | \psi \rangle = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

(b) ~~Postulat 5~~ : Soit $\mathcal{A}$ une grandeur physique d'un système et A l'observable correspondante. Soit a_n une valeur propre de A dégénérée g_n fois et associée aux vecteurs propres orthonormés $|u_{n,k}\rangle$. Lorsqu'on mesure $\mathcal{A}$ sur le système dans l'état $|\psi\rangle$ de norme unité, la probabilité $\mathcal{P}(a_n)$ d'obtenir comme résultat de mesure a_n est donnée par :

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{k=1}^{g_n} |\langle u_{n,k} | \psi \rangle|^2$$

Remarque : On peut vérifier que la probabilité totale est égale à 1.

$$\mathcal{P} = \mathcal{P}(a_1) + \mathcal{P}(a_2) + \dots = \sum_{n=1}^{N} \mathcal{P}(a_n) = 1$$

5) Postulat 5 : Réduction du paquet d'ondes

Lorsque la mesure de la grandeur physique $\mathcal{A}$ sur le système dans l'état $|\psi(t)\rangle$ donne le résultat a_n, l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée :

$$|\psi'\rangle = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$$

sur le sous-espace propre associé à a_n.

6) Postulat 6 : Evolution dans le temps

L'évolution au cours du temps de l'état d'un système physique est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

$H(t)$: est l'opérateur hamiltonien (l'observable associée à l'énergie totale du système).

$|\psi(t)\rangle$: est l'état du système à l'instant t.

7) Postulat 7 : Quantification des grandeurs physiques.

A toute grandeur physique $\mathcal{A}$ définie classiquement est associée une observable A obtenue en remplaçant dans l'expression convenablement symétrisée $\mathcal{A}$, le vecteur position $\vec{r}$ et impulsion $\vec{p}$ par les observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$.

II) Les caractérisations de la mesure.

1) Valeur moyenne d'une observable

Considérons un système quantique dans un état quelconque $|\psi\rangle$. La valeur moyenne, notée $\langle A\rangle$, d'une observable A est donnée par :

$$\langle A\rangle = \frac{\langle\psi|A|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

ou encore

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n \, \mathcal{P}(a_n)$$

Démonstration : $\langle A\rangle = \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n)$

$$= \sum_n a_n \langle\psi|P_n|\psi\rangle$$

$$= \sum_n a_n \langle\psi|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \langle\psi|A|u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|A \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|A|\psi\rangle$$

avec $A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$

et $\sum_n |u_n\rangle\langle u_n| = \mathbb{1}.$

2) Relations d'incertitude de Heisenberg

A) Ecart quadratique moyen

On définit l'écart quadratique moyen par :

$$\boxed{\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}}$$

B) Forme générale des Relations ~~générales~~ d'incertitude

Considérons un système physique dans l'état $|\psi\rangle$ et deux observables A et B, quelconques qui ne commutent pas c'est à dire $[A,B] \neq 0$.

On a la relation ~~générale d'incertitude~~ suivante :

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

La relation (*) est la forme générale des relations d'incertitude pour deux observables quelconques.

C) Relations d'incertitude de Heisenberg

En appliquant cette inégalité aux composantes des observables $\vec{R}$ et $\vec{P}$ qui sont telles que : $[x, P_x] = [y, P_y] = [z, P_z] = i\hbar$

On a :

$$|\langle [x, P_x] \rangle| = |\langle [Y, P_y] \rangle| = |\langle [Z, P_z] \rangle| = |\langle i\hbar \rangle| = \hbar$$

On obtient :

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta x . \Delta P_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y . \Delta P_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z . \Delta P_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}}$$

_Ces trois inégalités constituent les inégalités spatiales d'Heisenberg.

Discussion : On ne peut donc définir avec précision à la fois position et impulsion de la particule, d'où l'impossibilité de déterminer une trajectoire car cela implique la connaissance exacte de x, y, z et leurs dérivées.

d) Equation d'évolution des valeurs moyennes

Considérons une observable A et un système dans l'état normé $|\psi(t)\rangle$. Calculons l'evolution de la valeur moyenne, $\langle A \rangle$, dans le temps. : $\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$ avec $\langle \psi | \psi \rangle = 1$

L'evolution de $\langle A \rangle$ s'obtient en dérivant son expression par rapport au temps.

On a :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \left(\langle \psi | A | \psi \rangle \right)$$

$$= \left(\frac{d\langle \psi |}{dt} \right) A | \psi \rangle + \langle \psi | A | \left(\frac{d|\psi\rangle}{dt} \right) + \langle \psi | \frac{dA}{dt} | \psi \rangle$$

Comme :

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt}$$

et l'hamiltonien H étant hermitique ($H = H^{\dagger}$), on a aussi

$$\langle \psi(t) | H = -i\hbar \frac{d\langle \psi(t)|}{dt}$$

ce qui donne : $\dfrac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \dfrac{1}{i\hbar} H|\psi(t)\rangle$ et $\dfrac{d\langle \psi(t)|}{dt} = -\dfrac{1}{i\hbar} \langle \psi(t)| H$

Remplaçant les deux dernières relations dans $\frac{d}{dt}\langle A\rangle$, on obtient :

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|HA|\psi\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|AH|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi\rangle$$

Soit en définitive :

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

Ainsi, on a :

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle} \quad a$$

Si l'observable A ne dépend pas explicitement du temps on aura :

$$\boxed{\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle} \quad b$$

Les équations a et b constituent le théorème d'Ehrenfest.

e) Constante du mouvement

On appelle constante du mouvement toute observable A qui :

1) – ne dépend pas du temps : $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$

2) – et qui commute avec l'hamiltonien H : $[A,H] = 0$

Ce qui donne :

$$\boxed{\frac{d\langle A\rangle}{dt} = 0}$$

alors A est dite constante du mouvement.

ex : si le système est conservatif H ne dépend pas de t, et l'hamiltonien H est lui-même une constante du mouvement.

f) Relation d'incertitude temps – énergie

$$\boxed{\Delta E \cdot \tau \geq \frac{\hbar}{2}}$$

III) Systèmes Conservatifs

En mécanique quantique, un système est dit conservatif lorsque son hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps.

1) ⊛ Si à l'instant $t=0$, le système est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)\,|\varphi_n\rangle$$

⟹ A l'instant t, le système sera dans l'état :

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0)\, e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}\,|\varphi_n\rangle}$$

où E_n : sont les valeurs propres (les niveaux d'énergie)

$|\varphi_n\rangle$: " " vecteurs " (les états stationnaires de H)

Chaque facteur du dévelopement est multiplié par un facteur de phase $e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}}$ qui dépend de l'énergie E_n correspondant à $|\varphi_n\rangle$.

2) ⊛ Si l'instant initial correspond à $\boxed{t=t_0}$ et non à $t=0$

c'est à dire si l'on a :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0)\,|\varphi_n\rangle$$

⟹ A l'instant t, le système sera dans l'état :

$$\boxed{|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0)\, e^{\frac{-iE_n}{\hbar}(t-t_0)}\,|\varphi_n\rangle}$$