MQI: Cours 6

Inégalités d'Heisenberg, Ensembles Complets d'Observables qui Commutent (ECOC), Equations d'Ehrenfest revisitées

Propriétés Mathématiques du « commutateur »

Rappel: $\left[\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}\right] = \hat{\boldsymbol{A}}\hat{\boldsymbol{B}} - \hat{\boldsymbol{B}}\hat{\boldsymbol{A}}$

(a) $[.,.]$ est **bilinéaire**. Si $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ sont des opérateurs et $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$,

$$\left[\lambda\,\hat{A} + \mu\,\hat{B}, \hat{C}\right] = \lambda\left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \mu\,[\hat{B}, \hat{C}] \text{ et } \left[\hat{C}, \lambda\,\hat{A} + \mu\,\hat{B}\right] = \lambda\left[\hat{C}, \hat{A}\right] + \mu\left[\hat{C}, \hat{B}\right]$$

(b) $[.,.]$ est **antisymétrique**. Si $\hat{A}$, $\hat{B}$ sont des opérateurs:

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

(c) $[.,.]$ vérifie « **l'identité de Jacobi** ». Si $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ sont des opérateurs:

$$\left[\hat{A}, \left[\hat{B}, \hat{C}\right]\right] + \left[\hat{C}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + \left[\hat{B}, \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\right] = 0$$

(d) $[.,.]$ agit comme une « **dérivation** ». Si $\hat{A}$, $\hat{B}$, $\hat{C}$ sont des opérateurs:

$$\left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B} \;\; et \left[\hat{C}, \hat{A}\hat{B}\right] = \hat{A}\left[\hat{C}, \hat{B}\right] + \left[\hat{C}, \hat{A}\right]\hat{B}$$

(e) $[.,.]$ vérifie $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^{\dagger} = \left[\hat{B}^{\dagger}, \hat{A}^{\dagger}\right]$

<u>**Remarque**</u>: une opération interne $(u, v) \mapsto [u, v]$ sur un espace vectoriel (ici l'espace vectoriel des opérateurs) qui vérifie les conditions (a), (b), (c) est appelée un « **crochet de Lie** ».

Inégalité d'Heisenberg: Formule générale

Hypothèses: Soit un système dans un état (normalisé) $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ et soient $\hat{A}$ et $\hat{B}$ deux observables (opérateurs hermitiens) **qui à priori ne commutent pas**.

Position du problème: On s'intéresse aux écarts quadratiques $\Delta_\psi \hat{A}$ et $\Delta_\psi \hat{B}$.

- Par un choix convenable de $|\psi\rangle$ peut-on rendre **à la fois** $\Delta_\psi \hat{A}$ et $\Delta_\psi \hat{B}$ aussi petit que l'on veut?
- Pour étudier la question on regarde si le produit $\Delta_\psi \hat{A}\, \Delta_\psi \hat{B}$ a **une borne inférieure nulle ou non-nulle**.

Inégalité de Heisenberg générale

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Delta_\psi \hat{A}\, \Delta_\psi \hat{B} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right| \geq \frac{1}{2}\operatorname*{Inf}_{\psi}\left|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right|}$$

(Preuve diapo suivante)

Inégalités d'Heisenberg: Preuve (1)

($\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont hermitiens)

- Soit $|\psi\rangle$ **normalisé fixé.** Posons $a = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \in \mathbb{R}$ et b= $\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle \in \mathbb{R}$.
- Définissons l'opérateur $\widehat{K}_\lambda = \hat{A} - a\, Id_{\mathcal{H}} + i\,\lambda\,(\hat{B} - b\, Id_{\mathcal{H}})$ avec $\lambda \in \mathbb{R}$.

1) $(\Delta_\psi \hat{A})^2 = \left\langle\psi\middle|(\hat{A}-a)^2\middle|\psi\right\rangle$ et $(\Delta_\psi \hat{B})^2 = \left\langle\psi\middle|(\hat{B}-b)^2\middle|\psi\right\rangle$

On « omet » $Id_{\mathcal{H}}$ dans les formules suivantes.

Preuve: $\left\langle\psi\middle|(\hat{A}-a)^2\middle|\psi\right\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2 - 2a\hat{A} + a^2|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - 2a^2 + a^2 = (\Delta_\psi \hat{A})^2$

2) $\forall\lambda \in \mathbb{R}, \langle\psi|\widehat{K}_\lambda^\dagger\, \widehat{K}_\lambda|\psi\rangle = \left\|\widehat{K}_\lambda|\psi\rangle\right\|^2 \geq 0$

$$\forall\lambda \in \mathbb{R},$$
$$\widehat{K}_\lambda^\dagger\, \widehat{K}_\lambda = (\hat{A}-a)^2 + i\lambda\,[\hat{A}-a, \hat{B}-b] + \lambda^2(\hat{B}-b)^2 = (\hat{A}-a)^2 + i\lambda\,[\hat{A},\hat{B}] + \lambda^2(\hat{B}-b)^2$$

Remarque $\hat{C} = i[\hat{A}\,,\hat{B}]$ est hermitien: $\hat{C}^\dagger = (-i)[\hat{A}\,,\hat{B}]^\dagger = -i[\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger] = i[\hat{A}\,,\hat{B}] = \hat{C}$

3) $\forall\lambda \in \mathbb{R}, P(\lambda) = \lambda^2(\Delta_\psi \hat{B})^2 + \lambda\langle\psi|\hat{C}|\psi\rangle + (\Delta_\psi \hat{A})^2 \geq 0$

Inégalités d'Heisenberg: Preuve (2)

($\hat{A}$ et $\hat{B}$ sont hermitiens => $\hat{C} = i[\hat{A}, \hat{B}]$ hermitien)

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}, P(\lambda) = \lambda^2 (\Delta_\psi \hat{B})^2 + \lambda \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle + (\Delta_\psi \hat{A})^2 \geq 0$$

Le discriminant Δ doit être négatif soit $\Delta = \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2 - 4 (\Delta_\psi \hat{B})^2 (\Delta_\psi \hat{A})^2 \leq 0$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Delta_\psi \hat{A}\, \Delta_\psi \hat{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right| \geq \frac{1}{2} \operatorname*{Inf}_{\psi} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|}$$

Inégalités d'Heisenberg: Cas particuliers

Particule à 1D:

Opérateurs de position $\hat{Q}$ et d'impulsion $\hat{P}$ avec $[\hat{Q},\hat{P}] = i\hbar\, Id_{\mathcal{H}}$

$$\boxed{\Delta_\psi \hat{Q}\, \Delta_\psi \hat{P} \geq \frac{\hbar}{2}}$$

On ne peut pas définir **à la fois** la position et l'impulsion avec une incertitude aussi faible que l'on veut: $\Delta_\psi \hat{Q} \searrow \implies \Delta_\psi \hat{P} \nearrow$

Particule à 3D:

Position $(\hat{Q}_j) = (\hat{X},\hat{Y},\hat{Z})$ et impulsion $(\hat{P}_k) = (\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z)$ avec $[\hat{Q}_j,\hat{P}_k] = i\hbar\, \delta_{jk}\, Id_{\mathcal{H}}$

$$\boxed{\Delta_\psi \hat{X}\, \Delta_\psi \hat{P}_x \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta_\psi \hat{Y}\, \Delta_\psi \hat{P}_y \geq \frac{\hbar}{2}, \qquad \Delta_\psi \hat{Z}\, \Delta_\psi \hat{P}_z \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Spin de l'électron:

Opérateurs $(\hat{S}_k) = (\hat{S}_x,\hat{S}_y,\hat{S}_z)$ avec $[\hat{S}_x,\hat{S}_y] = i\hbar\, \hat{S}_z$

$$\boxed{\Delta_\psi \hat{S}_x\, \Delta_\psi \hat{S}_y \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle\psi|\hat{S}_z|\psi\rangle\right|}$$

Inégalité d'Heisenberg « Temps-Energie » (1)

Remarque Importante: Le statut de cette « inégalité » est différent des autres.

- Les inégalités vues précédemment sont « strictement vraies » du point de vue statistique (elles se démontrent rigoureusement).
- L'inégalité « Temps-Energie » est une inégalité « effective » ou « approximative ».

Pourquoi? Le temps en MQ N'EST PAS une « observable » (ce n'est pas une propriété mesurable relative au système étudié). **Le temps est un paramètre extérieur défini par l'observateur (l'horloge fixée au mur)**.

Conséquence et Problème: Un intervalle de temps Δt quelconque « ne représente rien » en lui-même pour le système étudié $\Longrightarrow$ Il faut pouvoir définir **un intervalle de temps $\boldsymbol{\tau_c}$ caractéristique de l'évolution du système étudié**. Comment faire?

Idée: Prendre comme « paramètre d'évolution » du système, non pas le temps, mais la valeur moyenne d'une observable particulière (et importante) du système.

Inégalité d'Heisenberg « Temps-Energie » (2)

Rappel (cours3-diapo30): **Equation d'Ehrenfest**

Si le Hamiltonien est $\hat{H}$, pour toute observable $\hat{A}$ on a, en notant $\langle\hat{A}\rangle(t) = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$:

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

Hypothèse: $\hat{A}$ est une observable « essentielle» du système (en dehors de l'énergie) et $\langle\hat{A}\rangle(t)$ est un « bon indicateur » de l'évolution du système.

Temps Caractéristique:

- Durant un (petit) intervalle de temps δt la grandeur $\langle\hat{A}\rangle(t)$ évolue de $\delta A = \delta t\,\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}$,
- En même temps on a une incertitude sur $\hat{A}$ donnée par $\Delta_{\psi(t)}\hat{A}$
- **Définition du temps $\boldsymbol{\tau_c}$ caractéristique**: τ_c est l'intervalle de temps δt nécessaire pour que le changement δA de $\langle\hat{A}\rangle$ dépasse son incertitude $\Delta_{\psi(t)}\hat{A}$ soit:

$$\frac{1}{\tau_c} \cong \frac{1}{\Delta_{\psi(t)}\hat{A}}\left|\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}\right| = \frac{1}{\hbar}\,\frac{1}{\Delta_{\psi(t)}\hat{A}}\,\left|\langle\psi(t)|[\hat{A},\hat{H}]|\psi(t)\rangle\right|$$

Inégalité d'Heisenberg « Temps-Energie » (3)

$$\frac{1}{\tau_c} \cong \frac{1}{\Delta_{\psi(t)}\hat{A}} \left|\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt}\right| = \frac{1}{\hbar}\frac{1}{\Delta_{\psi(t)}\hat{A}} \left|\langle\psi(t)|[\hat{A},\hat{H}]|\psi(t)\rangle\right|$$

D'après l'inégalité d'Heisenberg:

$$\Delta_\psi\hat{H}\,\Delta_\psi\hat{A} \geq \frac{1}{2}\left|\langle\psi|[\hat{A},\hat{H}]|\psi\rangle\right| = \frac{\hbar}{2}\,\frac{\Delta_\psi\hat{A}}{\tau_c} \Longrightarrow \quad \Delta\hat{H}\,\tau_c \gtrsim \frac{\hbar}{2}$$

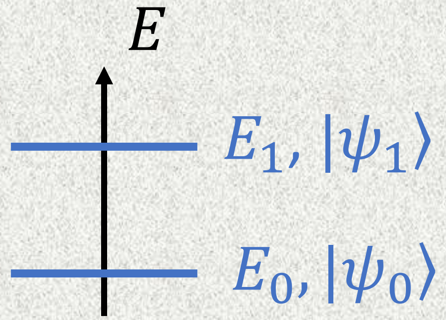
Comme $\Delta\hat{H}$ représente l'incertitude sur l'énergie on obtient l'inégalité d'Heisenberg effective « temps-énergie » suivante:

$$\Delta E\,\Delta t \gtrsim \frac{\hbar}{2} \text{ avec } \Delta t \cong \tau_c$$

(Exemple d'application diapo suivante)

Inégalité « Temps-Energie »: exemple (1)

Electrodynamique: Emission spontanée



✦ **<u>Atome isolé</u>** modélisé par deux niveaux d'énergie (modèle à deux états)
Les états $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$ <u>sont stationnaires</u>.

✦ Mais le modèle de l'atome isolé n'est pas réaliste: l'atome est « couplé » naturellement au « champ électromagnétique du vide ». Il en résulte:

- l'Hamiltonien du système est modifié,
- $\Longrightarrow$ l'état $|\psi_1\rangle$ **n'est plus stationnaire** (n'est plus état propre de l'Hamiltonien),
- L'atome peut émettre un photon **<u>d'énergie moyenne</u>** $E_{photon} = E_1 - E_0$,
- C'est le phénomène **d'émission spontanée**.
- **Question: quelle est l'incertitude ΔE_{photon} sur l'énergie du photon émis?**

Inégalité « Temps-Energie »: exemple (2)

Electrodynamique: Emission spontanée

✦ Si on suppose qu'à $t = 0$ l'atome est dans l'état $|\psi_1\rangle$, la probabilité $P_1(t)$ qu'il soit toujours dans l'état $|\psi_1\rangle$ à l'instant t est donnée par $P_1(t) = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$ avec $\hat{A} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$.
Le calcul donne: $P_1(t) \cong e^{-t/\tau_R}$ où τ_R est un temps caractéristique: le temps de « relaxation ».

✦ L'application de l'inégalité temps-énergie conduit à écrire:

$$\boldsymbol{\Delta E_{photon} \cong \frac{\hbar}{2\,\tau_R}}$$

✦ Ce ΔE est ce que l'on appelle la « **largeur naturelle** » de la raie spectrale $\bar{E}_{photon} = E_1 - E_0$.

Inégalités d'Heisenberg: observables qui commutent

Si $\hat{A}$ et $\hat{B}$ commutent il n'y a aucune contrainte liant $\Delta_\psi \hat{A}$ et $\Delta_\psi \hat{B}$ $\Rightarrow$ on peut réduire les deux incertitudes à la fois $\Rightarrow$ les valeurs de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ peuvent être définies en même temps.

$\Rightarrow$ On retrouve le fait que deux observables qui commutent sont diagonales dans la même base orthonormée.

Question: Peut-on définir DES ensembles MAXIMAUX d'observables qui commutent (des observables qui peuvent avoir des valeurs bien définies en même temps)?

Réponse: OUI grâce aux « ECOC » (diapo suivante).

ECOC (1)

ECOC: Ensemble **C**omplet d'**O**bservables qui **C**ommutent
(en anglais CSCO: Complete Set of Commuting Observables)

<u>Rappel</u>: Un ensemble $\mathcal{F} = \{\hat{A}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1\ldots N}$ d'opérateurs hermitiens qui commutent tous deux à deux ($\forall\alpha,\beta, [\hat{A}^{(\alpha)},\hat{A}^{(\beta)}] = 0$) possède une **base orthonormée <u>commune</u> de vecteurs propres**.

<u>Définition</u>: Un ensemble $\mathcal{F} = \{\hat{A}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1\ldots N}$ **<u>d'opérateurs hermitiens qui commutent deux à deux</u>** est appelé un **ECOC** si et seulement si:

(a) Pour **<u>chaque donnée</u>** d'un N-uple de valeurs propres des $\{\hat{A}^{(\alpha)}\}$, soit $\left(a_{i_1}^{(1)}, a_{i_2}^{(2)} \ldots a_{i_N}^{(N)}\right)$, il existe un **<u>unique</u> vecteur propre** $\left|a_{i_1}^{(1)}, a_{i_2}^{(2)} \ldots a_{i_N}^{(N)}\right\rangle$ **commun aux** $\{\hat{A}^{(\alpha)}\}$.

(b) Si on enlève un opérateur à l'ensemble $\mathcal{F}$ la propriété précédente est fausse. C'est-à-dire qu' il existe au moins un (N-1)-uple de valeurs propres $\left(a_{i_1}^{(1)}, a_{i_2}^{(2)} \ldots a_{i_N}^{(N-1)}\right)$ associé à plusieurs vecteurs propres communs aux $\{\hat{A}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1\ldots N-1}$.

Dit autrement $\mathcal{F} = \{\hat{A}^{(\alpha)}\}_{\alpha=1\ldots N}$ est un ECOC s'il définit une **UNIQUE base orthonormée**.

ECOC (2)

Remarques

✦ **Intérêt des ECOC(s)**: chaque ECOC (il y a toujours différents ECOCs possibles pour un système donné) permet « d'indéxer » les vecteurs d'une base orthonormée par les valeurs mesurables de différentes observables du système.

✦ **Remarque**: Un ECOC peut être constitué d'une seule observable. Il suffit pour cela que l'observable en question ait un spectre non-dégénéré.

✦ **Exemples d'ECOC**:

- Pour le spin de l'électron la base $|\pm\rangle$ est définie par les valeurs propres de l'opérateur de spin $\hat{S}_z$, donc $\hat{S}_z$ est un ECOC (pour le spin).
- Pour la particule à 1D, la base $\{|x\rangle\}$ est définie par les valeurs propres de la position $\hat{Q}$, et la base $\{|p\rangle\}$ est définie par les valeurs propres de la position $\hat{P}$, donc $\hat{Q}$ (ou $\hat{P}$) est un ECOC.
- Pour la particule à 3D, la base $\{|\vec{r}\rangle\}$ est définie par les valeurs propres des 3 opérateurs $(\hat{Q}_j) = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$. Donc les $(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ forment un ECOC.

Equation d'Ehrenfest: particule 1D

Rappel (cours3-diapo30): **Equation d'Ehrenfest**
Si le Hamiltonien est $\hat{H}$, pour toute observable $\hat{A}$ on a, en notant $\langle \hat{A} \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$:

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

Particule 1D: $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(\hat{Q})$

$\frac{d\langle \hat{Q} \rangle}{dt}(t) = ?$ et $\frac{d\langle \hat{P} \rangle}{dt}(t) = ?$

Calculs:

- $[\hat{Q}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{Q}, \hat{P}^2] + [\hat{Q}, \mathrm{V}(\hat{Q})] = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}[\hat{Q}, \hat{P}] + [\hat{Q}, \hat{P}]\hat{P}\right) + 0$
- $[\hat{Q}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}(i\hbar\, Id_{\mathcal{H}}) + (i\hbar\, Id_{\mathcal{H}})\hat{P}\right)$
- $[\hat{Q}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{P}$
- $[\hat{P}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{P}, \hat{P}^2] + [\hat{P}, \mathrm{V}(\hat{Q})] = 0 + [\hat{P}, \mathrm{V}(\hat{Q})]$
- $([\hat{P}, \mathrm{V}(\hat{Q})]\psi)(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}(V(x)\psi(x)) - V(x)\left(-i\hbar\frac{d\psi}{dx}\right) = -i\hbar V'(x)\psi(x)$
- $[\hat{P}, \hat{H}] = -i\hbar V'(\hat{Q})$

Equation d'Ehrenfest: particule 1D

Particule 1D

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

$$[\hat{Q},\hat{H}] = \frac{i\hbar}{m}\hat{P} \text{ et } [\hat{P},\hat{H}] = -i\hbar V'(\hat{Q})$$

Conclusion:

$$\boldsymbol{\frac{d\langle \hat{Q}\rangle}{dt}(t) = \frac{1}{m}\langle \hat{P}\rangle(t)} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\frac{d\langle \hat{P}\rangle}{dt}(t) = -\langle V'(\hat{Q})\rangle(t)}$$

$\Longrightarrow$ On retrouve les équations hamiltoniennes classiques, mais en valeur moyenne.

FIN COURS 6