Université Pierre et Marie Curie

M1 - parcours OACOS & AP — Année 2009–10

Physique Quantique Appliquée

Travaux Dirigés n°4

Théorème d'Ehrenfest et ECOC

On considère un système physique évoluant grâce à l'Hamiltonien $H = \frac{\overrightarrow{p}^2}{2m} + V\left(\overrightarrow{r}\right)$.

I - Théorème d'Ehrenfest et constantes du mouvement

Dans cet exercice, on montre comment l'évolution au cours du temps de la valeur moyenne d'un opérateur (quantique!) est proche de l'évolution classique de la grandeur physique associée.

I.1 - *Rappeler la définition de la valeur moyenne $\langle A\rangle$ d'un opérateur A, et exprimer sa dérivée par rapport au temps en fonction de $\frac{\partial A}{\partial t}$ et du commutateur $[A,H]$ ("théorème d'Ehrenfest").*

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{d}{dt}\langle A\rangle &= i\hbar\frac{d}{dt}\left(\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle / \langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle\right)\\
&= \left(i\hbar\frac{d}{dt}\left(\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle\right)\right)/\left(\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle\right)\\
&\quad - \frac{\left(\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle\right)}{\left(\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle\right)^2} * i\hbar\frac{d}{dt}\left(\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle\right)
\end{aligned}
$$

$$
i\hbar\frac{d}{dt}\left(\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle\right) = \left(i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)
$$

$$
i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad \text{donc :} \quad -i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|H^+ = \langle\psi(t)|H
$$

d'où :

$$
i\hbar\frac{d}{dt}\left(\langle\psi(t)\,|\psi(t)\rangle\right) = -\langle\psi(t)|H|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|H|\psi(t)\rangle = 0
$$

$$
\begin{aligned}
& i\hbar\frac{d}{dt}\left(\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle\right)\\
&= \left(i\hbar\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right)A|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\right)|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|A\left(i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle\right)\\
&= -\langle\psi(t)|HA|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|AH|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\right)|\psi(t)\rangle\\
&= \langle\psi(t)|\left([A,H] + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\right)|\psi(t)\rangle
\end{aligned}
$$

et finalement :

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

I.2 - *Appliquer ce résultat aux opérateurs position $\widehat{x}$ et impulsion $\widehat{p}$ (à 1 dimension), puis comparer les équations obtenues aux équations du mouvement de la mécanique classique $\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$ et $\frac{dp}{dt} = -dV(x)/dx$. Dans quel cas sont-elles identiques ? ("limite classique")*

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}$$
$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

Les équations (1) et (2) sont similaires aux équations de Hamilton de la Mécanique Classique :

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \tag{1}$$
$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \tag{2}$$

Les valeurs moyennes (les "centres" physiques des fonctions d'ondes) n'évoluent donc pas - en toute rigueur - comme en Mécanique Classique. Cela n'est vrai qu'en moyenne !
Plus précisément, c'est vrai lorsque :

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_{\langle x\rangle}$$

i.e. pour des potentiels V très particuliers ou lorsque la fonction d'ondes concernée est suffisamment "piquée" autour de $\langle x\rangle$:

$$\begin{aligned}\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle &= \int dx\ \psi^*(x)\ \frac{\partial V}{\partial x}\ \psi(x) \\ &= \int dx\ |\psi(x)|^2\ \frac{\partial V}{\partial x}\end{aligned}$$

avec $|\psi(x)|^2 \simeq \delta(x - \langle x\rangle)$ (limite classique) :

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \simeq \int dx\ \delta(x - \langle x\rangle)\ \frac{\partial V}{\partial x} = \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)_{\langle x\rangle}$$

I.3 - *Pour un oscillateur harmonique unidimensionnel, l'Hamiltonien s'écrit $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m}{2}\omega^2 x^2$. Calculer $\frac{d\langle\widehat{x}\rangle}{dt}$ et $\frac{d\langle\widehat{p}\rangle}{dt}$. Conclure.*

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}$$
$$\frac{\partial V}{\partial x} = m\omega^2 x$$
$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -m\omega^2 \langle x\rangle$$

Cas particulier où Mécanique Quantique = Mécanique Classique, au sens où les prévisions de ces 2 mécaniques (en ce qui concerne l'évolution) sont semblables.

I.4 - *En s'aidant du résultat obtenu à la 1ère question, donner la condition pour que la valeur moyenne d'un opérateur reste constante lors de l'évolution du système ("constantes du mouvement (quantiques)").*
Que devient cette condition pour un opérateur indépendant du temps ?

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle = 0$$

Que devient cette condition pour un opérateur indépendant du temps ?

$$\langle [A,H]\rangle = 0$$

i.e. que $[A,H] = 0$ est une condition suffisante.

I.5 - A quelles "constantes du mouvement" classiques correspondent les valeurs moyennes suivantes :

a) $\langle H \rangle$ lorsque H est indépendant du temps

Energie

b) $\langle \overrightarrow{p} \rangle$ lorsque $H = \overrightarrow{p}^2/2m$ (particule libre)

Quantité de mouvement

c) $\langle 1 \rangle$ où 1 est l'opérateur identité

Matière (équation de continuité), cf interprétation en terme de "fluide de particules"

I.6 - *Pour un potentiel central $V(\overrightarrow{r}) = V(r)$ (c'est-à-dire à symétrie sphérique), on montre que $[L_i, V(r)] = 0$ (pour $i = x, y, z$) et on note $\left[\overrightarrow{L}, V(r)\right] = \overrightarrow{0}$. L'opérateur $\overrightarrow{L}$ est l'opérateur moment cinétique, dont les trois composantes sont définies par :*

$$L_x = yp_z - zp_y \;\; ; \;\; L_y = zp_x - xp_z \;\; ; \;\; L_z = xp_y - yp_y$$

(que l'on note aussi $\overrightarrow{L} = \overrightarrow{r} \wedge \overrightarrow{p}$, ou $L_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} x_j p_k$ où ϵ_{ijk} est le tenseur complètement antisymétrique de Levi-Civita).

a) Calculer $\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right]$, puis $\left[\overrightarrow{L}, H\right]$.

$$\begin{aligned}
\left[L_z, \overrightarrow{p}^2\right] &= \left[L_z, p_x^2 + p_y^2 + p_z^2\right] \\
\left[L_z, p_x^2\right] &= p_x \left[L_z, p_x\right] + \left[L_z, p_x\right] p_x \\
\left[L_z, p_x\right] &= \left[xp_y - yp_x, p_x\right] = i\hbar p_y \\
\left[L_z, p_x^2\right] &= 2i\hbar p_y p_x \\
\left[L_z, p_y^2\right] &= -2i\hbar p_y p_x \\
\left[L_z, p_z^2\right] &= 0 \\
\left[L_z, \overrightarrow{p}^2\right] &= 0 \\
\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right] &= \overrightarrow{0}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left[\overrightarrow{L}, H\right] &= \left[\overrightarrow{L}, \frac{\overrightarrow{p}^2}{2m} + V(r)\right] \\
&= \frac{1}{2m}\left[\overrightarrow{L}, \overrightarrow{p}^2\right] + \left[\overrightarrow{L}, V(r)\right] = \overrightarrow{0}
\end{aligned}$$

b) $\left\langle \overrightarrow{L} \right\rangle$ est-elle une constante du mouvement ? Pouvait-on s'en douter au vu de la "symétrie" du potentiel ?

$$\left[\overrightarrow{L}, H\right] = 0$$

Donc $\left\langle \overrightarrow{L} \right\rangle$ constante du mouvement, associée à la symétrie par rotation du potentiel. Résultat très général : symétrie $\longleftrightarrow$ constante du mouvement. Très important en physique fondamentale.

II - Ensemble Complet d'Observables Commutantes - ECOC

La notion d'ECOC est particulièrement importante lorsque l'on désire mesurer/préparer complétement l'état d'un système physique.
Elle s'appuie mathématiquement sur les deux propriétés (importantes !) suivantes :

Propriété 1 : " Si deux observables A et B commutent, il existe une base de Vecteurs Propres communs à A et B. "

Propriété 2 : " Soient trois observables A , B et C , vérifiant :

$$[A, C] = 0 \quad ; \quad [B, C] = 0 \quad ; \quad [A, B] \neq 0$$

alors au moins une des valeurs propres de C est dégénérée. "

II.1 - *Appliquer la seconde propriété au cas où $C = H$, $A = L_x$ et $B = L_y$ en s'aidant de la question I.6. Conclusion.*

L'application au cas où $C = H$, $A = L_x$ et $B = L_y$ est importante : dans le cas d'un potentiel à symétrie sphérique, au moins une des vp de H (énergie) est dégénérée. C'est un résultat très général qui complète la conclusion de la question I.6. :

$$\text{symétrie} \longleftrightarrow \text{constante du mouvement} \longleftrightarrow \text{dégénérescence}$$

II.2 - *On considère un système physique dont l'espace des états (à trois dimensions) est rapporté à la base orthonormée formée par les trois kets $|u_1\rangle$, $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$. Dans la base de ces vecteurs, les deux opérateurs L_z et S sont définis par :*

$$L_z |u_1\rangle = 0 \qquad L_z |u_2\rangle = |u_2\rangle \qquad L_z |u_3\rangle = -|u_3\rangle$$
$$S |u_1\rangle = |u_1\rangle \qquad S |u_2\rangle = |u_3\rangle \qquad S |u_3\rangle = |u_2\rangle$$

a) Ecrire les matrices représentant, dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$, les opérateurs L_z, L_z^2, S et S^2. Ces opérateurs sont-ils des observables ?

$$L_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad ; \quad L_z^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$
$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad S^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Tous observables.

b) L_z^2 et S forment-ils un ECOC ? Donner une base de Vecteurs Propres communs.

De façon évidente, $|u_1\rangle$ est VP de S pour la vp 1 (car $S|u_1\rangle = |u_1\rangle$), et aussi VP de L_z^2 pour la vp 0 (car $L_z^2 |u_1\rangle = 0$). Il faut donc seulement étudier la restriction de S au sous-espace sous-tendu par les 2 vecteurs $\{|u_2\rangle, |u_3\rangle\}$:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

dans lequel L_z^2 est égal à l'identité. vp : ± 1 et VP : $|w_{2,3}\rangle = (|u_2\rangle \pm |u_3\rangle)/\sqrt{2}$. Dans la b.o.n. : $\left\{|w_1\rangle = |u_1\rangle, |w_2\rangle = (|u_2\rangle + |u_3\rangle)/\sqrt{2}, |w_3\rangle = (|u_2\rangle - |u_3\rangle)/\sqrt{2}\right\}$, on a alors :

$$L_z^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

A chaque couple de vp est associé un unique VP $|w_i\rangle$, on peut donc conclure que L_z^2 et S forment un ECOC.

c) *L_z et S forment-ils un ECOC ? Et L_z^2 et S^2 ?*

$$[L_z, S] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & -2 & 0 \end{pmatrix} \neq 0$$

$$\Longrightarrow \quad \text{pas ECOC!}$$

$$\left[L_z^2, S^2\right] = 0 \quad \text{car} \quad S^2 = \text{matrice unité}$$

donc L_z^2 *et* S^2 compatibles,

mais ils ne forment pas un ECOC

car le couple de vp $(1,1)$ correspond à 2 VP différents : $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$,

l'ensemble des observables commutantes $\left\{L_z^2, S^2\right\}$ n'est donc pas complet.