

Mesure des grandeurs physiques

Chapitre 3
+
§3.3 du chapitre 4

1.

La mesure des grandeurs physiques :

position, impulsion, énergie, ...

Les buts de cet amphi

Comprendre la signification physique du formalisme mis en place

Quelle est l'information acquise lors d'une mesure ?

Formulation du principe 3, d'abord sous une forme « faible », puis sous sa forme « forte »

Exploiter le lien entre « quantités physiques » et « opérateurs »

*Valeurs propres et fonctions propres,
résolution de l'équation de Schrödinger*



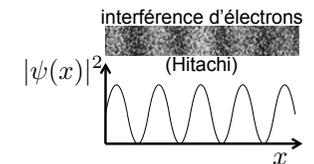
2

Mesures de position et d'impulsion

Particule ponctuelle de fonction d'onde $\psi(x)$

Densité de probabilité pour la position : $|\psi(x)|^2$

$$\langle x \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx$$



Mesure d'impulsion, par exemple par une expérience de temps de vol

$$\psi(x) \xleftrightarrow{\text{TF}} \varphi(p) \quad dP = |\varphi(p)|^2 dp \quad (p \equiv p_x)$$

$$\langle p \rangle = \int p |\varphi(p)|^2 dp$$

qui s'écrit aussi (isométrie + dérivation) : $\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} dx$

Structure commune en termes d'opérateurs

Valeur moyenne de la position

$$\langle x \rangle = \int \psi^*(x) [\hat{x} \psi(x)] dx \quad \hat{x} : \text{multiplication par } x$$

$$= \langle \psi | \hat{x} \psi \rangle \quad \psi(x) \xrightarrow{\hat{x}} x \psi(x)$$

Valeur moyenne de l'impulsion

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) [\hat{p} \psi(x)] dx \quad \hat{p} \equiv \hat{p}_x : \text{dérivation par rapport à } x \text{ (à } \hbar/i \text{ près)}$$

$$= \langle \psi | \hat{p} \psi \rangle \quad \psi(x) \xrightarrow{\hat{p}} \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(x)}{dx}$$

Rappel du produit scalaire « naturel » dans L_2 : $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int \psi_1^*(x) \psi_2(x) dx$

La mesure d'une grandeur physique

Principe 3 (version « faible »)

À toute grandeur physique A , on peut associer une « observable » \hat{A}

\hat{A} : opérateur linéaire hermitien agissant dans l'espace des fonctions d'onde

Si on prépare un grand nombre de systèmes identiques tous dans l'état $\psi(x)$ et qu'on mesure A sur chacun, la moyenne $\langle a \rangle$ des résultats vaut

$$\langle a \rangle = \int \psi^*(x) [\hat{A} \psi(x)] dx = \langle \psi | \hat{A} \psi \rangle$$

Opérateur hermitien :

$\langle \psi_1 | \hat{A} \psi_2 \rangle = \langle \hat{A} \psi_1 | \psi_2 \rangle$ ce qui entraîne en particulier que $\langle a \rangle$ est réel

Comment construire l'opérateur \hat{A} associé à A ?

quantité physique	action de l'opérateur associé sur $\psi(\vec{r})$
position x, y, z, \vec{r}	multiplication par x, y, z, \vec{r}
impulsion p_x, p_y, p_z \vec{p}, p^2	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ $\hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$ $\hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$ $\hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$
énergie totale $E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$	Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r})$ $= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$
moment cinétique $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ $L_z = xp_y - yp_x$	opérateur moment cinétique $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

2.

Valeurs propres et fonctions propres d'un opérateur

Définition générale

On dit que $\psi_\alpha(x)$ est une fonction propre de l'opérateur \hat{A} , associé à une quantité physique A , si cette fonction n'est pas identiquement nulle et si

$$\hat{A}\psi_\alpha(x) = a_\alpha \psi_\alpha(x)$$

Le nombre a_α (même dimension que A) est la valeur propre associée à $\psi_\alpha(x)$

Théorème spectral : en dimension finie, un opérateur hermitien (du type de ceux qui sont associés aux grandeurs physiques) est diagonalisable : on peut former une base de l'espace de fonctions avec ses vecteurs propres.

Subtilités avec notre espace de fonctions, qui est de dimension infinie...

L'exemple de l'opérateur impulsion

Valeurs propres q et fonctions propres $\psi_q(x)$ de l'impulsion $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$:

$$\hat{p}\psi_q(x) = q\psi_q(x)$$

$$\frac{d\psi_q}{dx} = \frac{iq}{\hbar}\psi_q \Rightarrow \psi_q(x) = C e^{iqx/\hbar}$$

Les fonctions propres de l'impulsion sont les ondes planes.

Le spectre de l'impulsion (ensemble de ses valeurs propres) est l'ensemble des nombres réels \mathbb{R} .

Les fonctions propres de l'hamiltonien

Fonctions qui vont jouer un rôle crucial pour étudier l'évolution des systèmes

$$\hat{H}\psi_E(x) = E \psi_E(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} + V(x)\psi_E(x) = E \psi_E(x) \quad (\text{à une dimension})$$

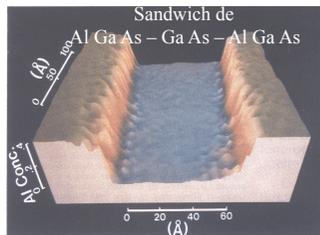
La résolution de cette équation passe en général par un traitement numérique.

Il existe cependant quelques cas solubles analytiquement :

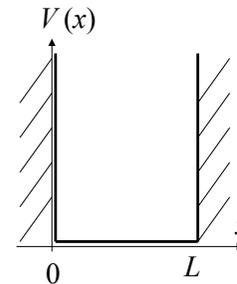
→ **potentiel harmonique** $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

→ **potentiel coulombien** $V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

→ **potentiel constant par morceau**



Le puits carré infini



$$\hat{H}\psi_E(x) = E \psi_E(x)$$

pour simplifier les notations: $\psi_E(x) \equiv \psi(x)$

$$0 \leq x \leq L$$

$$x < 0 \text{ ou } x > L$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E \psi(x)$$

$$\psi(x) = 0$$

$\psi(x)$ continue



conditions aux limites :

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Les valeurs propres de l'énergie du puits carré infini

Si on choisit E réelle négative : pas de solution (à vérifier en exercice)

Pour E réelle et positive : posons $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ $E = \hbar^2 k^2 / 2m$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \psi(x) \quad \text{s'écrit alors} \quad \psi''(x) = -k^2 \psi(x)$$

→ Forme générale des solutions : $\psi(x) = \alpha \sin(kx) + \beta \cos(kx)$

→ Limite en $x = 0$: $\psi(0) = 0 \Rightarrow \beta = 0$

→ Limite en $x = L$: $\psi(L) = 0 \Rightarrow \alpha \sin(kL) = 0 \Rightarrow \sin(kL) = 0$

Les vecteurs d'onde k ne peuvent prendre que des valeurs discrètes :

$$k = k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, \dots$$

et les valeurs propres pour l'énergie sont « quantifiées » : $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$

Les « états stationnaires » du puits carré infini

Les fonctions propres de l'hamiltonien s'écrivent donc

$$\psi_n(x) = \alpha \sin(k_n x) \quad \text{avec} \quad k_n = n\pi/L$$

$$\text{Normalisation : } \int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad \alpha = \sqrt{2/L}$$

L'ensemble des ψ_n forme une « base » orthonormée de l'espace des fonctions d'onde telles que $\psi(0) = \psi(L) = 0$

$$\rightarrow \text{orthonormalité : } \int_0^L \psi_n(x) \psi_\ell(x) dx = \delta_{n,\ell}$$

→ développement d'une fonction d'onde sur cette « base » :

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{+\infty} C_n \psi_n(x) \quad \sum_{n=1}^{+\infty} |C_n|^2 = 1$$

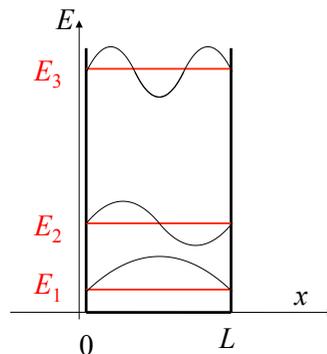
similaire à un développement d'une fonction périodique en série de Fourier

Bilan pour le puits carré infini

$$E_n = n^2 E_1 \quad n = 1, 2, \dots$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$

$$\psi_n(x) \propto \sin(n\pi x/L)$$



Ordres de grandeur

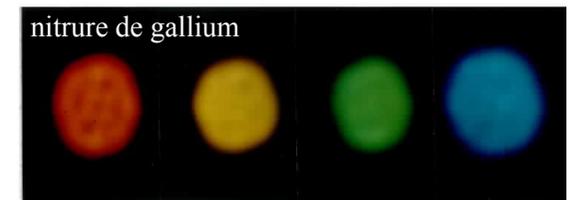
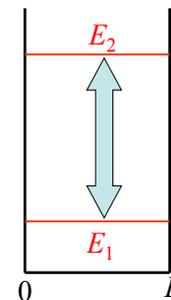
- un électron dans un puits quantique de largeur $L = 6 \cdot 10^{-9}$ m

$$E_1 = 10 \text{ meV}$$

- un nucléon (proton ou neutron) dans un noyau de diamètre $L = 4 \cdot 10^{-15}$ m

$$E_1 = 10 \text{ MeV}$$

Émission de lumière par un puits quantique



$L=12$ couches atomiques

$L=6$ couches atomiques

$$E_2 - E_1 = (4 - 1) \times \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$$



Photo: P. Reiss/CEA

3.

Quels résultats pour une mesure individuelle ?

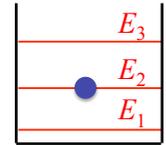
Quantité physique A , décrite par l'observable \hat{A}

Spectre de valeurs propres a_α discret (ce qui exclut l'opérateur « impulsion »)

Base orthonormée de fonctions propres ψ_α : $\int \psi_\beta^*(x) \psi_\alpha(x) dx = \delta_{\alpha,\beta}$

pour tout ψ : $\psi(x) = \sum_\alpha C_\alpha \psi_\alpha(x)$ avec $\sum_\alpha |C_\alpha|^2 = 1$

Préambule 1 : lien entre « résultats de mesure » et « valeurs propres »



On s'intéresse à la mesure d'une quantité physique A sur une particule préparée dans l'état $\psi(x)$

Le résultat de la mesure de A est certain (ou prédéterminé) si et seulement si l'état $\psi(x)$ est un état propre de l'observable \hat{A}

Preuve du sens direct de l'équivalence

Si $\psi(x) = \psi_\alpha(x)$, alors le résultat de la mesure de A est certain.

$$\langle a \rangle = \int \psi_\alpha^*(x) [\hat{A} \psi_\alpha(x)] dx = \int \psi_\alpha^*(x) [a_\alpha \psi_\alpha(x)] dx = a_\alpha$$
$$\langle a^2 \rangle = \int \psi_\alpha^*(x) [\hat{A}^2 \psi_\alpha(x)] dx = a_\alpha^2 \quad \Rightarrow \quad \Delta a^2 = \langle a^2 \rangle - (\langle a \rangle)^2 = 0$$

Par exemple, un état propre de l'hamiltonien est un état d'énergie bien définie.

Préambule 1 (suite)

Preuve du sens réciproque de l'équivalence

On suppose que la particule est dans un état $\psi(x)$ tel que la quantité A est « bien définie » : pas de fluctuations des résultats de mesure

$$\langle a \rangle = \int \psi^*(x) [\hat{A} \psi(x)] dx \quad \Delta a^2 = 0$$

Alors, $\psi(x)$ est état propre de \hat{A} avec la valeur propre $\langle a \rangle$.

Démonstration :

$$0 = \int \psi^*(x) [(\hat{A} - \langle a \rangle)^2 \psi(x)] dx$$
$$= \int [(\hat{A} - \langle a \rangle) \psi(x)]^* [(\hat{A} - \langle a \rangle) \psi(x)] dx$$
$$\Rightarrow (\hat{A} - \langle a \rangle) \psi(x) = 0 \quad \Rightarrow \hat{A} \psi(x) = \langle a \rangle \psi(x)$$

Conclusion : le résultat de la mesure de A est certain si et seulement si l'état de la particule est un état propre de \hat{A} . Le résultat est la valeur propre associée.

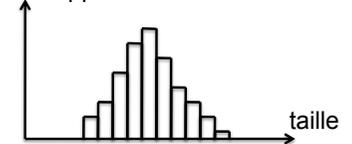
Préambule 2 : qu'attend-on d'une mesure ?

La mesure d'une quantité physique fournit un nombre (ou un ensemble de nombres) qui apporte une information sur le système étudié.

Tailles d'une population :



taux d'apparition

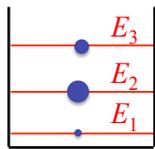


Pour que l'information fournie ne soit pas factice, il faut que les mesures d'une même quantité (ici la taille d'un individu donné) à deux instants « très proches » donnent le même résultat.

« très proches » : l'état du système n'évolue pas de manière significative entre les deux mesures.

Quel est l'état de la particule après une mesure ?

Exemple d'une mesure d'énergie dans un puits



état initial

$$\psi(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$$

à l'instant t_1

mesure de l'énergie :
résultat ε

Quelles sont les valeurs possibles de ε ?
Quel est l'état après mesure ?

cf. préambule 2 :
à l'instant t_2

une nouvelle mesure de l'énergie sur le même système à un instant t_2 « très proche » de t_1 doit donner avec certitude le résultat ε

Pour que le résultat à l'instant t_2 soit avec certitude égal à ε , il faut (cf. préambule 1) que:

- (i) ε soit une des valeurs propres E_n de l'opérateur énergie
- (ii) le système soit dans un état propre ψ_n de l'opérateur énergie à l'instant t_2
mesure à t_1 : $\psi(x) \longrightarrow \psi_n(x)$

Les résultats possibles pour une mesure individuelle

Si on mesure la quantité physique A , les seuls résultats de mesure possibles sont les valeurs propres de l'opérateur \hat{A} .

➡ Si la particule est avant la mesure dans l'état propre ψ_α de \hat{A} , alors le résultat est avec certitude la valeur propre a_α .

➡ Si la particule est avant la mesure dans un état quelconque

$$\psi = \sum_\alpha C_\alpha \psi_\alpha \quad \text{avec} \quad \sum_\alpha |C_\alpha|^2 = 1$$

alors le résultat sera aléatoirement une des valeurs propres a_α .

Quelle est la loi de probabilité correspondante ?

Cette loi se déduit de : $\langle a \rangle = \int \psi^* [\hat{A} \psi] dx = \dots = \sum |C_\alpha|^2 a_\alpha$

$$\langle a^n \rangle = \int \psi^* [\hat{A}^n \psi] dx = \dots = \sum |C_\alpha|^2 a_\alpha^n$$

Loi de probabilité pour a_α : $p_\alpha = |C_\alpha|^2$

Version forte du principe de la mesure

On s'intéresse à la mesure d'une quantité physique A , d'observable \hat{A}

Valeurs propres a_α et fonctions propres orthonormées ψ_α de \hat{A}

$$\hat{A} \psi_\alpha(x) = a_\alpha \psi_\alpha(x)$$

a_α supposée ici non dégénérée

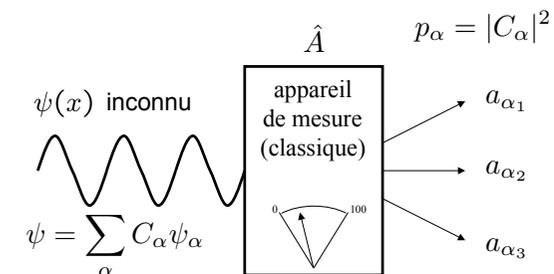
Avant la mesure : $\psi(x) = \sum_\alpha C_\alpha \psi_\alpha(x)$ avec $\sum_\alpha |C_\alpha|^2 = 1$

Principe 3 (version « forte »)

- ➡ Le résultat a d'une mesure individuelle de la grandeur physique A est nécessairement une des valeurs propres a_α de \hat{A}
- ➡ La probabilité p_α de trouver le résultat a_α est $p_\alpha = |C_\alpha|^2$
- ➡ Juste après une mesure ayant donné le résultat a_α , la fonction d'onde de la particule est $\psi_\alpha(x)$

Qu'apprend-on dans une mesure ?

Une mesure individuelle, sur une particule donnée, donne un renseignement sur l'état du système après mesure :



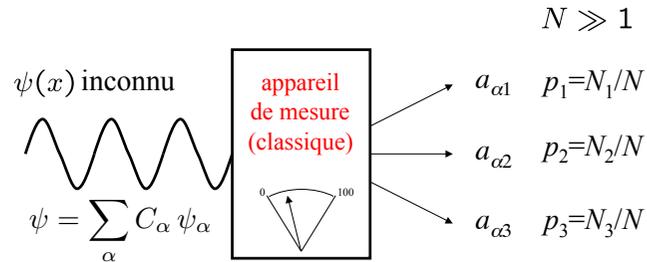
Si le résultat est α_2 , l'état après cette mesure est :
 $\psi = \psi_{\alpha_2}$

On ne peut pas, avec cette seule mesure, reconstruire l'état $\psi(x)$
On sait seulement que p_{α_2} n'était pas nulle...

La fonction d'onde est modifiée de manière irréversible par la mesure :
« réduction du paquet d'ondes »

Qu'apprend-on dans une mesure (II) ?

Si on dispose de N particules préparées dans le même état $\psi(x)$ inconnu, on peut en effectuant une fois la mesure de A sur chaque particule déterminer les probabilités p_α



À partir de $p_\alpha = |C_\alpha|^2$, on peut reconstruire $\psi(x)$ (au moins partiellement)

4.

Etats propres de l'hamiltonien et résolution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}, t)$$

On se limite ici au cas où V ne dépend pas du temps : $V(\hat{x}, t) = V(\hat{x})$

Évolution d'un état quelconque

On détermine les états propres de l'hamiltonien : $\hat{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$

Les états $\psi_n(x)$ forment une « base » de l'espace des fonctions d'onde

Fonction d'onde initiale de la particule : $\psi(x, 0) = \sum_n C_n \psi_n(x)$

Alors la fonction d'onde à l'instant t vaut : $\psi(x, t) = \sum_n C_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

Démonstration : le $\psi(x, t)$ proposé est-il solution de $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t)$?

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = i\hbar \sum_n C_n \psi_n(x) \left(\frac{-iE_n}{\hbar} \right) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n C_n E_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\hat{H} \psi(x, t) = \sum_n C_n \hat{H} \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_n C_n E_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

La résolution d'un problème de mécanique quantique commence presque toujours par la détermination des fonctions propres de l'énergie.

Les états propres de l'hamiltonien sont des « états stationnaires »

Si on prépare la particule dans un de ces états à $t = 0$: $\psi(x, 0) = \psi_n(x)$

alors la solution de l'équation de Schrödinger à l'instant t est

$$\psi(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

La probabilité de présence n'évolue pas : $|\psi(x, t)|^2 = |\psi_n(x)|^2$

et il en va de même pour la valeur moyenne de toute quantité physique

$$\begin{aligned} \langle a \rangle(t) &= \int \psi^*(x, t) [\hat{A} \psi(x, t)] dx \\ &= \int \psi_n^*(x) [\hat{A} \psi_n(x)] dx \end{aligned}$$

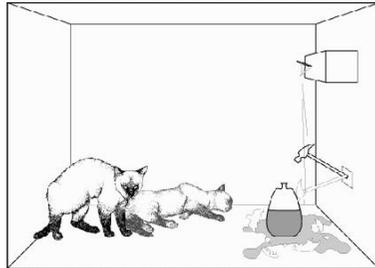
Un état d'énergie bien définie n'est pas « en mouvement » !

Le chat de Schrödinger

Principe de superposition : si ψ_1 et ψ_2 sont des fonctions d'onde « éligibles », alors $\psi = (\psi_1 + \psi_2) / \sqrt{2}$ l'est aussi.

Électron dans l'expérience des trous d'Young :
« passé dans le trou de gauche » ET « passé dans le trou de droite »

Le dispositif diabolique
de Schrödinger :



Après un temps bien choisi : $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\text{chat vivant}} + \psi_{\text{chat mort}})$

Le rôle de la mesure

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\text{chat vivant}} + \psi_{\text{chat mort}})$$

On ouvre la boîte et on regarde l'état de santé du chat

Une chance sur deux de le trouver en vie...

Y avait-il moyen de prévoir ce qui allait arriver ?

Non ! il ne s'agit pas d'une probabilité classique
comme dans un tirage à « pile OU face »

Quand le chat meurt-il ?

Tant qu'on n'a pas fait la mesure, l'état du système (chat+ atome+
cyanure) est une superposition cohérente des deux situations

« vivant » ET « mort » : on pourrait en principe reconstruire $\psi(0)$

ET quantique \neq OU classique

La décohérence

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\text{chat vivant}} + \psi_{\text{chat mort}})$$

Pour un système macroscopique, couplé à l'environnement, la cohérence
quantique entre les états « vivant » et « mort » disparaît très rapidement :

ET quantique $\xrightarrow{\text{décohérence}}$ OU classique

Quels sont les plus gros objets sur lesquels on va pouvoir observer
le « ET » quantique ?

interférences de grosses molécules (virus ?), cohérence quantique
dans des boucles de supraconducteurs (SQUID), ...

→ importance pratique considérable pour le développement
de futurs « ordinateurs quantiques »...