Commutation des observables

Chapitre 7

Commutation des observables

→ Quelles sont les quantités conservées dans un problème donné de mécanique quantique ?

énergie, impulsion, moment cinétique...

Théorème d'Ehrenfest

→ A quelle condition peut-on connaître simultanément deux grandeurs physiques A et B, associées aux observables $\hat{A}$ et $\hat{B}$?

Si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ *, il est possible de préparer le système dans un état où les deux grandeurs physiques* A *et* B *sont bien déterminées.*

→ Comment tirer parti des symétries d'un système ?

1.

Evolution de la valeur moyenne d'une observable

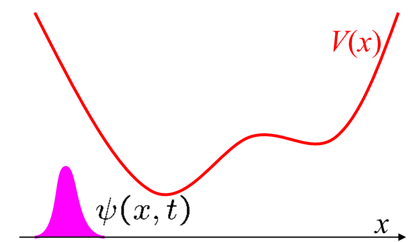
Le théorème d'Ehrenfest

Le théorème d'Ehrenfest

Système quantique d'hamiltonien $\hat{H}$ et préparé dans l'état $|\psi(t)\rangle$

Valeur moyenne d'une observable $\hat{A}$

$$\langle a \rangle(t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$$

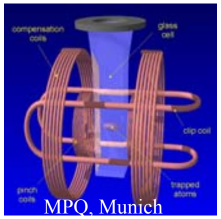


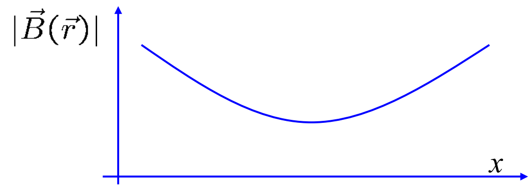
Pour une observable $\hat{A}$ indépendante du temps :

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

Atomes piégés et condensats de Bose-Einstein

Principe d'un piège magnétique pour atomes neutres :
on réalise avec des bobines un minimum local de $|\vec{B}(\vec{r})|$





Chaque atome porte un moment magnétique qu'on prépare dans une direction opposée à $\vec{B}$

$$V(\vec{r}) = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}(\vec{r}) = +|\vec{\mu}|\;|\vec{B}(\vec{r})| = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

La condensation de Bose-Einstein

Hamiltonien : $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2\right)$

$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

avec : $\hat{H}_x = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$, etc.

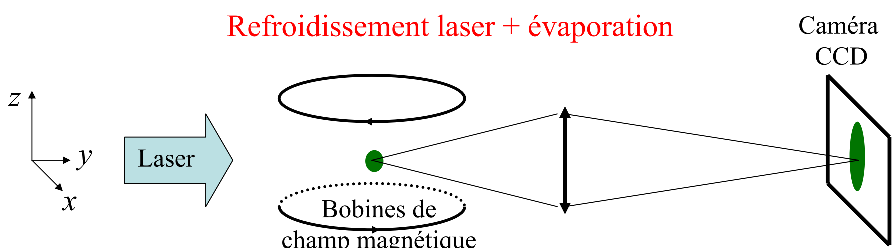
Einstein 1924 :
A suffisamment basse température (ici le microkelvin), une fraction importante des atomes doit s'accumuler dans l'état fondamental du piège

$$\Psi_{\text{fond.}}(\vec{r}) = \psi_0(x)\;\psi_0(y)\;\psi_0(z)$$

$\psi_0(x)$: gaussienne de largeur $\sqrt{\hbar/(m\omega)}$

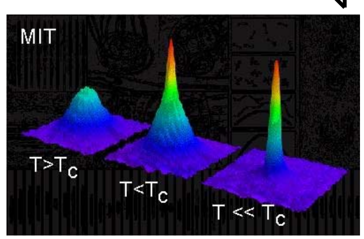
Observation expérimentale de la condensation

Refroidissement laser + évaporation



Boulder & MIT 1995

Mesure simultanée de x et z pour un grand nombre de systèmes quantiques (atomes) tous préparés dans le même état.

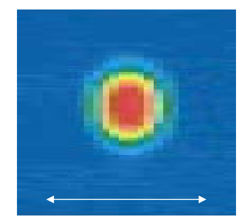


Oscillation d'un condensat dans un piège magnétique

On se limite au mouvement selon un axe :

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p_x\rangle}{m} \qquad \frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{dV}{dx}\right\rangle$$

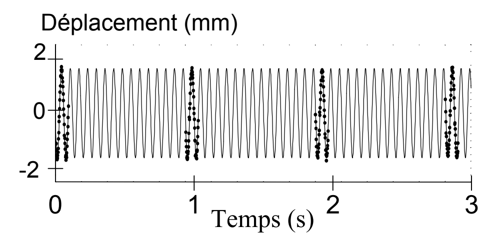
avec $V(x) = m\omega^2 x^2/2$



Equation du mouvement :

$$\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} + \omega^2\langle x\rangle = 0$$

$$\langle x\rangle(t) = x_0\;\cos(\omega t + \phi)$$



2.

Quantités conservées en mécanique quantique

$$[\widehat{A}, \widehat{H}] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d\langle a\rangle}{dt} = 0$$

La conservation de l'énergie

Considérons un système isolé, dont l'hamiltonien est indépendant du temps et prenons :

$$\widehat{A} = \widehat{H}$$

$[\widehat{H}, \widehat{H}] = 0$: bien sûr!

On a alors : $\langle a\rangle = E$ $\quad \frac{dE}{dt} = 0$

La conservation de l'impulsion pour une particule libre

Considérons une particule libre, dont l'hamiltonien est

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + \frac{\widehat{p}_y^2}{2m} + \frac{\widehat{p}_z^2}{2m}$$

$$= \frac{\widehat{\vec{p}}^{\,2}}{2m}$$

également noté $\frac{\widehat{p}^2}{2m}$

Les observables $\widehat{p}_x$, $\widehat{p}_y$, $\widehat{p}_z$ commutent avec cet hamiltonien, donc:

$$\frac{d\langle p_i\rangle}{dt} = 0 \;, \quad i = x, y, z$$

Remarque : ceci n'est plus vrai si $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\widehat{\vec{r}})$

Mouvement dans un potentiel central

Hamiltonien : $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\widehat{\vec{r}})$ avec $V(\vec{r}) = V(r)$

Exemple : atome d'hydrogène $V(r) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

Alors $\frac{d\langle L_i\rangle}{dt} = 0$, $i = x, y, z$ avec $\widehat{\vec{L}} = \widehat{\vec{r}} \times \widehat{\vec{p}}$

En effet, on pourra vérifier que : $\left[\widehat{L}_i, \frac{\widehat{p}^2}{2m}\right] = 0$ $\quad \left[\widehat{L}_i, V(\widehat{r})\right] = 0$

ce qui entraîne : $\left[\widehat{L}_i, \widehat{H}\right] = 0$

un exemple plus subtil de quantité pas toujours conservée :

la saveur d'une particule élémentaire (neutrino)

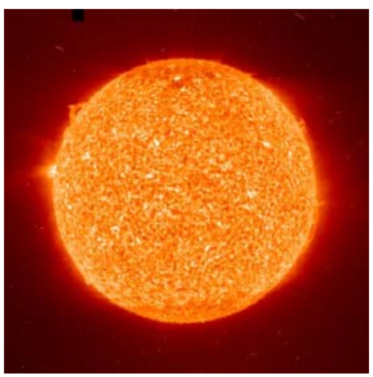
Familles de particules

	Charge	$1^{ère}$ famille	$2^{ème}$ famille	$3^{ème}$ famille
Leptons	-1	e *électron*	μ *muon*	τ *tau*
	0	ν_e *neutrino électronique*	ν_μ *neutrino muonique*	ν_τ *neutrino tauique*
Quarks	2/3	u *up*	c *charm*	t *top*
	-1/3	d *down*	s *strange*	b *bottom*

p : uud
proton

$n \longrightarrow p+e+\overline{\nu}_e$

L'énigme des neutrinos solaires



Les réactions nucléaires au sein du soleil entraînent l'émission d'un nombre considérable de neutrinos électroniques.

Selon les modèles les plus précis, 65 milliards de neutrinos électroniques devraient arriver sur terre chaque seconde sur une surface de 1 cm^2

Les signaux mesurés correspondent à la moitié de ce flux

Où sont les neutrinos manquants ?

L'oscillation des neutrinos

Description de l'entité "neutrino" dans un espace à trois dimensions:

états de *saveur* bien déterminée : $|\nu_e\rangle$, $|\nu_\mu\rangle$, $|\nu_\tau\rangle$

états de *masse* (donc d'*énergie*) bien déterminée : $|\nu_1\rangle$, $|\nu_2\rangle$, $|\nu_3\rangle$

Si les deux bases ne coïncident pas (c'est-à-dire si l'opérateur saveur ne commute pas avec l'hamiltonien), on a par exemple :

$$|\psi(0)\rangle = |\nu_e\rangle = \alpha|\nu_1\rangle + \beta|\nu_2\rangle$$

$$\Rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \alpha\, e^{-iE_1 t/\hbar}\,|\nu_1\rangle + \beta\, e^{-iE_2 t/\hbar}\,|\nu_2\rangle$$

$$P_e(t) = |\langle\nu_e|\psi(t)\rangle|^2 \;<\; 1 \qquad\qquad P_{\mu,\tau}(t) = |\langle\nu_{\mu,\tau}|\psi(t)\rangle|^2 \;\neq 0$$

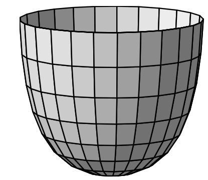
3.
Ensemble d'observables qui commutent

Si deux observables commutent, il existe une base formée de vecteurs propres communs à ces deux observables.

$$[\hat{A},\hat{B}]=0 \quad \Longrightarrow \quad \{|\psi_i\rangle\} \quad \begin{array}{l} \hat{A}|\psi_i\rangle=\alpha_i\,|\psi_i\rangle \\ \hat{B}|\psi_i\rangle=\beta_i\,|\psi_i\rangle \end{array}$$

Généralisation au cas de plusieurs observables

Exemple : l'oscillateur harmonique à deux dimensions



$$\hat{H}=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{\hat{p}_y^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}^2+\hat{y}^2\right)$$
$$=\hat{H}_x+\hat{H}_y$$

avec $\hat{H}_x=\dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$ et $\hat{H}_y=\dfrac{\hat{p}_y^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{y}^2$

On a : $[\hat{H},\hat{H}_x]=[\hat{H},\hat{H}_y]=[\hat{H}_x,\hat{H}_y]=0$

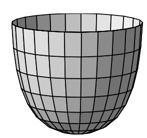
Base de fonctions propres communes à $\hat{H}_x$ et $\hat{H}_y$:

$\Psi_{n_1,n_2}(x,y)=\phi_{n_1}(x)\,\phi_{n_2}(y)$ ϕ_n : fonctions de Hermite

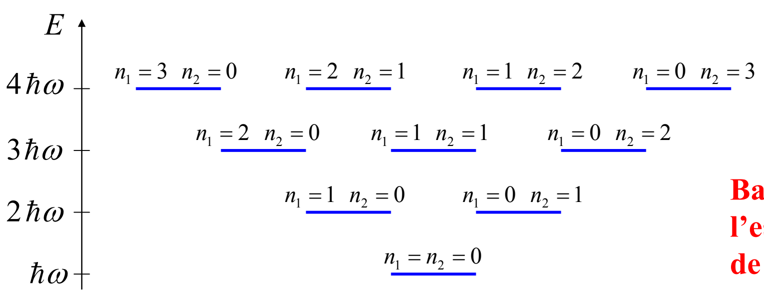
L'oscillateur harmonique à deux dimensions (suite)

Energies propres pour $\hat{H}_x$ et $\hat{H}_y$:

$$\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad \left(n_2+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$



Energies propres pour $\hat{H}$: $(n+1)\hbar\omega$ avec $n=n_1+n_2$



Base de l'espace de Hilbert

Ensemble
Complet
d'Observables qui
Commutent

Mathématiquement :

$\hat{A},\hat{B},\ldots,\hat{K}$ forment un ECOC s'ils commutent entre eux et si la base propre commune est unique (à une phase près).

Physiquement :

Si on mesure successivement les grandeurs physiques $A,B,\ldots,K$, le système est dans un état parfaitement déterminé après ces mesures.

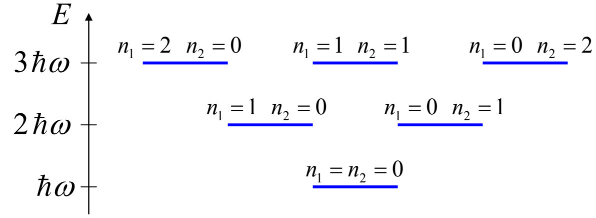
Un ECOC pour l'oscillateur harmonique 1D

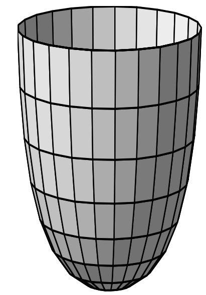
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \qquad \hat{H}|\phi_n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \, |\phi_n\rangle$$

$\hat{H}$ est un ECOC à lui tout seul. En effet, une mesure de l'énergie détermine sans ambiguïté l'état du système.

Un ECOC pour l'oscillateur harmonique 2D

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2\right)$$

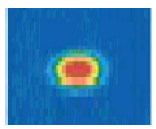




$\hat{H}$ n'est pas un ECOC à lui tout seul. Se donner une énergie propre (par exemple $2\hbar\omega$) ne détermine pas l'état propre de manière non ambiguë. En revanche, $\left\{\hat{H}_x, \hat{H}_y\right\}$ forme un ECOC

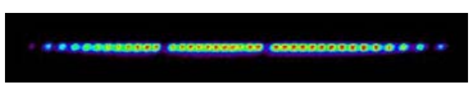
Exemples de systèmes quantiques complètement préparés

Un condensat de Bose-Einstein : un million d'atomes au fond d'un piège harmonique



Une cavité électromagnétique initialement vide dans laquelle un ou plusieurs atomes excités viennent déposer chacun un photon

Un ou plusieurs ions refroidis par laser dans un piège électrostatique



4.

Symétries de l'hamiltonien et recherche de ses états propres

Symétries de l'hamiltonien

Quand l'hamiltonien $\hat{H}$ a une symétrie (réflexion, rotation, translation), on peut chercher un opérateur $\hat{O}$ (hermitien ou unitaire) associé à cette symétrie et qui commute avec l'hamiltonien :

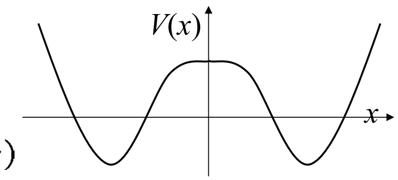
$$[\hat{H}, \hat{O}] = 0$$

On trouve d'abord une base propre de $\hat{O}$,
puis on cherche une base propre de $\hat{H}$
parmi les états propres de $\hat{O}$

Une symétrie fréquente à 1D: la parité

Mouvement dans un potentiel pair

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad \text{avec} \quad V(x) = V(-x)$$

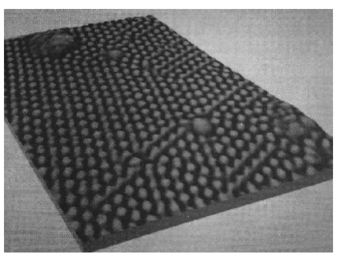


On décrit cette symétrie à l'aide de l'opérateur "parité" $\hat{P}$ défini par $\hat{P}\,\psi(x) = \psi(-x)$ $\Rightarrow$ $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$

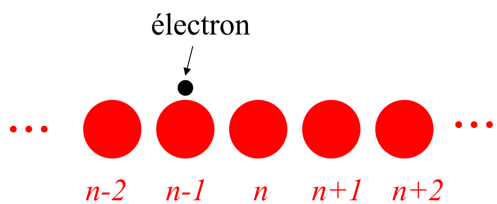
$\hat{P}^2 = 1$ $\rightarrow$ $\begin{cases} \text{Valeurs propres : } \pm 1 \\ \text{Etats propres: fonctions paires ou impaires} \end{cases}$

On cherche les états propres de $\hat{H}$
sous forme de fonctions paires ou impaires

Un modèle simple de conducteur électrique



modèle 1D : chaîne linéaire de N atomes



Hamiltonien décrivant le mouvement de l'électron dans la base $|n\rangle$

- Energie sur un site n donné : E_0
- Saut du site n vers le site $n\pm1$: potentiel de couplage $-A$ (cf. molécule d'ammoniac)

L'hamiltonien pour la chaîne linéaire d'atomes

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A & & & & & -A \\ -A & \ddots & \ddots & & & 0 & \\ & -A & E_0 & -A & & & \\ & & -A & E_0 & -A & & \\ & & & -A & E_0 & \ddots & \\ & 0 & & & \ddots & \ddots & -A \\ -A & & & & & -A & E_0 \end{pmatrix}$$

Etats propres ??? Energies propres ???

Recherche des états propres de l'hamiltonien

On introduit l'opérateur décalage $\widehat{D}$, qui fait passer du site *n* au site *n+1*

$$\widehat{D}|n\rangle = |n+1\rangle \qquad \widehat{D}|N\rangle = |1\rangle$$

$\widehat{D}$ est unitaire : $\widehat{D}^\dagger = \widehat{D}^{-1}$

$[\widehat{H}, \widehat{D}] = 0$: il existe une base de vecteurs propres communs aux deux opérateurs

Valeurs propres de $\widehat{D}$?

$\left(\widehat{D}\right)^N = 1$ ➡ les valeurs propres sont les racines N-ièmes de l'unité

$$\lambda_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{N}\right) \qquad j = 0, 1, \ldots, N-1$$

Vecteurs propres de $\hat{D}$ (et donc de $\hat{H}$)

$$\lambda_j = \exp\left(i\frac{2\pi j}{N}\right) \qquad j = 0, 1, \ldots, \frac{N}{2}, \ldots, N-1$$

(N pair)

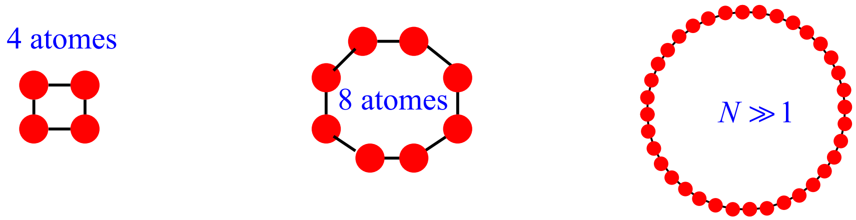
$\lambda_0 = 1$: $\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}1\\1\\\vdots\\1\end{pmatrix}$ électron délocalisé sur tous les sites avec la même amplitude

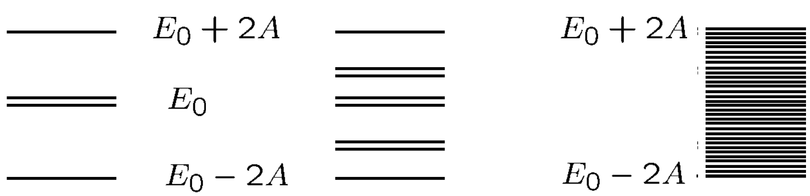
$\lambda_{N/2} = -1$: $\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}1\\-1\\1\\\vdots\end{pmatrix}$

λ_j quelconque : $\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{pmatrix}1\\\lambda_j\\\lambda_j^2\\\vdots\end{pmatrix}$

énergie $E_0 - 2A$ $\qquad E_0 + 2A \qquad E_0 - 2A\cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)$

Passage du microscopique au macroscopique





$$E_j = E_0 - 2A\cos\left(\frac{2\pi j}{N}\right)$$

Bande d'énergies permises : conducteur ou isolant (avec le principe de Pauli)