L3 - Physique-Chimie 29 octobre 2015
Mécanique quantique

TD n°4 : Formalisme de Dirac, mesures

1 Formalisme de Dirac : « bra » et « ket »

Nous avons vu que la fonction d'onde $\varphi(x)$ et sa transformée de Fourier $\tilde{\varphi}(p)$ offrent *deux manières* de présenter *la même* information sur l'état quantique d'une particule. Elles peuvent toutes deux s'interpréter comme les « composantes » d'un même vecteur d'état dans deux « bases » différentes. Nous allons maintenant raisonner sur la notion plus abstraite de « vecteur d'état », que nous noterons simplement $|\,\varphi\,\rangle$.

États quantiques et produit scalaire.– Le *produit scalaire* $\langle\,\chi\,|\,\varphi\,\rangle$ entre les vecteurs $|\,\chi\rangle$ et $|\,\varphi\rangle$ prend la forme du produit d'un vecteur dual, le « bra $\langle\,\chi\,|$ », avec le vecteur, le « ket $|\,\varphi\,\rangle$ ». On rappelle la propriété

$$\langle\,\chi\,|\,\varphi\,\rangle^* = \langle\,\varphi\,|\,\chi\,\rangle\ . \tag{1}$$

> Le produit scalaire a le *sens physique* suivant : sachant que le système est dans l'état quantique $|\,\varphi\,\rangle$, l'*amplitude* de probabilité pour l'observer dans l'état $|\,\chi\rangle$ est $\langle\,\chi\,|\,\varphi\,\rangle$.

1/ On considère un système (par exemple une molécule) pouvant être dans trois états quantiques $\{|\,u_1\,\rangle, |\,u_2\,\rangle, |\,u_3\,\rangle\}$ formant une base orthonormée de son espace des états. Quel vecteur colonne de $\mathbb{C}^3$ représente le vecteur d'état $|\,\varphi\,\rangle = \alpha\left[|\,u_1\,\rangle - \mathrm{i}|\,u_2\,\rangle\right]$? Comment représenter le vecteur dual $\langle\,\varphi\,|$? Normaliser le vecteur (i.e. calculer α).

Mêmes questions pour $|\,\chi\,\rangle = \beta\left[|\,u_1\,\rangle + \mathrm{i}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}|\,u_2\,\rangle - 2\mathrm{i}|\,u_3\,\rangle\right]$.

2/ Sachant que l'état initial est $|\,\varphi\,\rangle$, quelle est la probabilité d'observer le système dans l'état $|\,\chi\,\rangle$? Discuter la dépendance dans l'angle θ.

2 Observables et mesures

A. Observables.– Les grandeurs physiques (les « observables ») sont représentées par des opérateurs linéaires agissant dans l'espace des états quantiques.

1/ Donner trois exemples pour supporter cette assertion (penser à l'action de certains opérateurs sur la fonction d'onde $\varphi(x)$).

2/ Les observables physiques sont représentées par des opérateurs hermitiens, i.e. tels que [1] $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$. Justifier physiquement cette propriété.

[1] L'opérateur est donc représenté par une matrice notée A et telle que $(A^\dagger)_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} A^*_{ji} = A_{ij}$.

3/ Nous considérons à nouveau un système dont l'espace des états est de dimension trois. On note $\{|\,u_1\,\rangle, |\,u_2\,\rangle, |\,u_3\,\rangle\}$ une base orthonormée. On introduit

$$\hat{A} = -\mathrm{i}|\,u_1\,\rangle\langle\,u_2\,| + \mathrm{i}|\,u_2\,\rangle\langle\,u_1\,|\,, \tag{2}$$

$$\hat{B} = -\mathrm{i}|\,u_1\,\rangle\langle\,u_3\,| + |\,u_3\,\rangle\langle\,u_2\,|\,, \tag{3}$$

$$\hat{C} = \quad \mathrm{i}|\,u_3\,\rangle\langle\,u_3\,| + |\,u_2\,\rangle\langle\,u_1\,|\,. \tag{4}$$

Justifier que ces trois opérateurs sont des opérateurs linéaires. Par quelles matrices peut-on les représenter ? Peuvent-ils représenter des observables physiques ?

4/ Les produits $\hat{D}_y = \hat{B}\hat{C}$ et $\hat{D}_x = \hat{C}\hat{B}$ sont-ils hermitiens ? Le calcul du produit est-il plus facile avec la représentation matricielle ou avec la notation de Dirac ?

5/ Calculer le commutateur de $\hat{D}_x$ et $\hat{D}_y$.

6/ Quelles sont les valeurs propres et vecteurs propres de $\hat{D}_x$ et $\hat{D}_y$?

B. Mesures.– On considère le système initialement dans l'état $|\,\Psi_{\mathrm{initial}}\,\rangle = |\,u_1\,\rangle$.

1/ Quelle est la probabilité pour que la mesure de D_y donne $+1$? Quel est l'état après la mesure, noté $|\,\Psi_{y,+}\,\rangle$?

2/ Si le système est dans l'état $|\,\Psi_{y,+}\,\rangle$, quelle est la probabilité pour que la mesure de D_x donne $+1$? Quel est l'état après la mesure, noté $|\,\Psi_{x,+}\,\rangle$?

3/ Quelle est la probabilité pour qu'une nouvelle mesure de D_y donne -1 ?