

# 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*



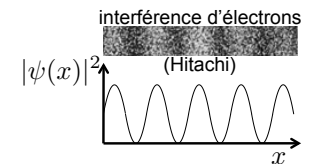
2

## 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 $p_x, p_y, p_z$ $\vec{p}, p^2$	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ $\hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad \hat{p}^2 = -\hbar^2 \Delta$
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 $\hat{\vec{L}} = \hat{r} \times \hat{\vec{p}}$ $\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

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  $a_\alpha$  (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

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

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

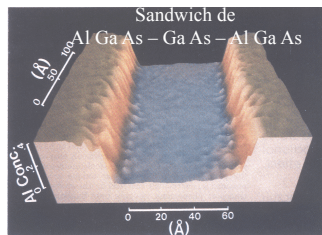
La résolution de cette équation passe en général par un traitement numérique.

Il existe cependant quelques cas solubles analytiquement :

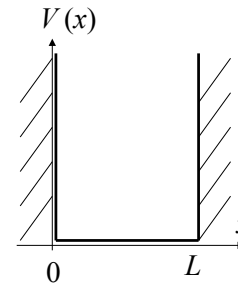
→ **potentiel harmonique**  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$

→ **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  $\psi_n$  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 » :

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

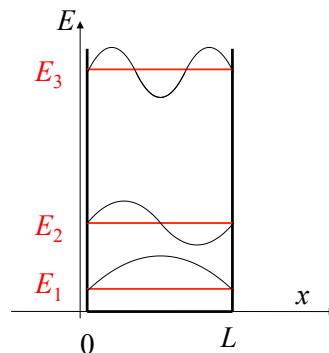
similaire à un développement d'une fonction périodique en série de Fourier

## 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

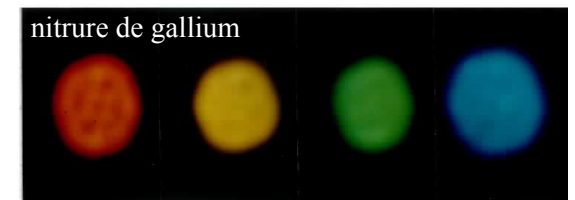
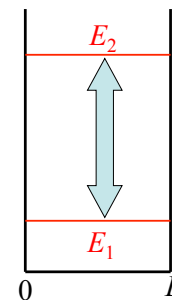
- un électron dans un puits quantique de largeur  $L = 6 \cdot 10^{-9}$  m

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

- 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

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

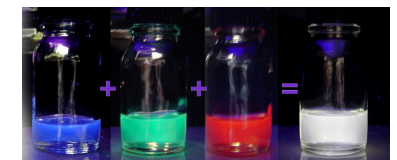


Photo: P. Reiss/CEA

### 3.

## Quels résultats pour une mesure individuelle ?

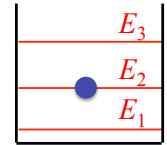
Quantité physique  $A$ , décrite par l'observable  $\hat{A}$

Spectre de valeurs propres  $a_\alpha$  discret (ce qui exclut l'opérateur « impulsion »)

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

pour tout  $\psi$  :  $\psi(x) = \sum_\alpha C_\alpha \psi_\alpha(x)$  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.

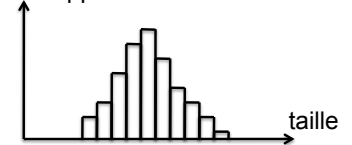
## Préambule 2 : qu'attend-on d'une mesure ?

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

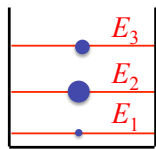


Pour que l'information fournie ne soit pas factice, il faut que les mesures d'une même quantité (ici la taille d'un individu donné) à deux instants « très proches » donnent le même résultat.

« 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  $\varepsilon$

Quelles sont les valeurs possibles de  $\varepsilon$  ?  
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  $\varepsilon$

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

- (i)  $\varepsilon$  soit une des valeurs propres  $E_n$  de l'opérateur énergie
- (ii) le système soit dans un état propre  $\psi_n$  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  $\psi_\alpha$  de  $\hat{A}$ , alors le résultat est avec certitude la valeur propre  $a_\alpha$ .

➡ 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  $a_\alpha$ .

Quelle est la loi de probabilité correspondante ?

Cette loi se déduit de :

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

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

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

## Version forte du principe de la mesure

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

Valeurs propres  $a_\alpha$  et fonctions propres orthonormées  $\psi_\alpha$  de  $\hat{A}$

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

$a_\alpha$  supposée ici non dégénérée

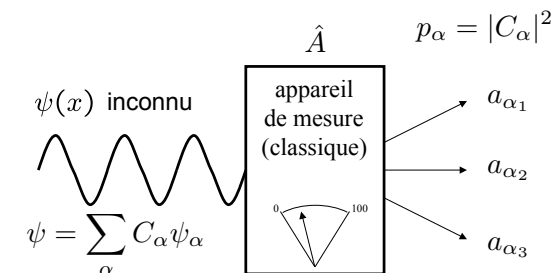
Avant la mesure :  $\psi(x) = \sum_\alpha C_\alpha \psi_\alpha(x)$  avec  $\sum_\alpha |C_\alpha|^2 = 1$

### Principe 3 (version « forte »)

- ➡ Le résultat  $a$  d'une mesure individuelle de la grandeur physique  $A$  est nécessairement une des valeurs propres  $a_\alpha$  de  $\hat{A}$
- ➡ La probabilité  $p_\alpha$  de trouver le résultat  $a_\alpha$  est  $p_\alpha = |C_\alpha|^2$
- ➡ Juste après une mesure ayant donné le résultat  $a_\alpha$ , 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 :



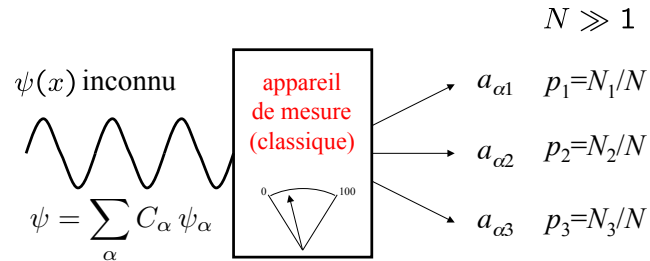
Si le résultat est  $\alpha_2$ , l'état après cette mesure est :  
 $\psi = \psi_{\alpha_2}$

On ne peut pas, avec cette seule mesure, reconstruire l'état  $\psi(x)$   
On sait seulement que  $p_{\alpha_2}$  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  $p_\alpha$



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

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

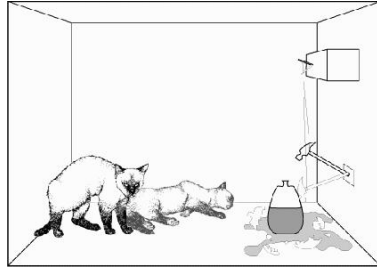
Un état d'énergie bien définie n'est pas « en mouvement » !

## Le chat de Schrödinger

Principe de superposition : si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  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 »...