

## CHAPITRE V

### Les inégalités d'Heisenberg

#### I Mesure de deux grandeurs physiques

##### I-1 Succession de mesures de deux grandeurs physiques

Considérons deux grandeurs physiques  $A$  et  $B$  auxquelles sont associées les opérateurs  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$ .

Les fonctions propres et les valeurs propres de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  répondent à:

$$\begin{aligned}\hat{A} \varphi_n &= a_n \varphi_n \\ \hat{B} \phi_\nu &= b_\nu \phi_\nu\end{aligned}$$

Dans un premier temps, nous supposons les valeurs propres non dégénérées.

Les indices latins sont réservés à  $\hat{A}$  et les indices grecs à  $\hat{B}$ .

A l'instant  $t_0$ , la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  peut se décomposer dans chacune des bases suivant:

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_n c_n(t_0) \varphi_n(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad \psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_\nu c_\nu(t_0) \phi_\nu(\mathbf{r})$$

Examinons les résultats de mesures successives des grandeurs physiques  $A$  et  $B$ .

Nous insistons sur le fait que les mesures successives sont réalisées les unes après les autres de façon immédiate, c'est à dire sans laisser s'écouler de temps entre deux mesures.

Cela signifie que entre la "fin" d'une mesure et le "début" de la mesure suivante, la fonction d'onde reste inchangée. Elle n'a pas le temps d'évoluer spontanément comme le dicte l'équation de Schrödinger.

##### *i) Effectuons une mesure de $A$ à l'instant $t_0$*

On sait que le résultat de mesure sera l'un des  $a_n$ , et que chacun des  $a_n$  présente une probabilité  $|c_n(t_0)|^2$  d'être trouvé.

Par hasard, le résultat de la mesure est  $a_p$ .

Après la mesure, la particule est décrite par la fonction  $\varphi_p$ .

##### *ii) Effectuons une seconde mesure de $A$ .*

Avant cette seconde mesure, la fonction d'onde est  $\varphi_p$ .

Puisque  $\varphi_p$  est fonction propre de  $\hat{A}$ , le résultat prévisible est  $a_p$  à coup sûr.

La mesure donne  $a_p$ , la fonction d'onde après mesure reste  $\varphi_p$ .

iii) *Effectuons une mesure de B*

Pour prédire le résultat de mesure de  $B$ , il faut développer la fonction d'onde de la particule dans la base des fonctions propres de  $\hat{B}$ .

Puisque à la suite des mesures précédentes, cette fonction d'onde est  $\varphi_p$ , cela s'écrit:

$$\varphi_p = \sum_v c_{vp} \phi_v$$

où:

$$c_{vp} = \int \phi_v^* \varphi_p d\tau$$

Le résultat prévisible de la mesure de  $B$  est  $b_v$  avec la probabilité  $|c_{vp}|^2$

Il se trouve que par hasard le résultat est  $b_\lambda$ .

Après mesure, la fonction d'onde est  $\phi_\lambda$ .

iv) *Effectuons une seconde mesure de B*

Le résultat prévisible est  $b_\lambda$  à coup sûr.

La fonction d'onde après mesure reste  $\phi_\lambda$ .

v) *Procédons à une nouvelle mesure de A*

Pour prédire le résultat de la mesure de  $A$ , il faut développer la fonction d'onde avant mesure dans la base des fonctions propres de  $\hat{A}$ .

Puisque par suite de la mesure de  $B$  la fonction d'onde est  $\phi_\lambda$ , cela s'écrit:

$$\phi_\lambda = \sum_n c_{n\lambda} \varphi_n$$

avec :

$$c_{n\lambda} = \int \varphi_n^* \phi_\lambda d\tau$$

Le résultat de mesure prévisible de  $A$  est  $a_n$  avec la probabilité  $|c_{n\lambda}|^2$

Il se trouve que le résultat est  $a_q$ .

Après mesure, la fonction d'onde est  $\varphi_q$ .

*etc...*

#### IV-2 Importance de l'ordre des mesures

Il est clair que les probabilités de résultat de mesure dépendent de manière cruciale de l'ordre des mesures et des résultats préalablement trouvés (par hasard). Par exemple les résultats de mesures prévisibles de  $A$  sont:

$a_n$  avec la probabilité  $|c_n(t_0)|^2$  lors de la mesure i)

$a_p$  à coup sûr lors de la mesure ii)

$a_n$  avec la probabilité  $|c_{n\lambda}|^2$  lors de la mesure v)

Il apparaît en particulier que le fait d'effectuer une mesure de  $B$  entre deux mesures de  $A$  redistribue les probabilités de résultat de mesure de  $A$ .

Les probabilités de résultat de la deuxième mesure de  $A$  dépendent du résultat de la mesure de  $B$  réalisée entre les deux mesures de  $A$ .

### IV-3 Grandeurs compatibles

Il apparaît aussi que si l'état d'une particule est tel que le résultat de mesure d'une grandeur est prévisible à coup sûr (par exemple celle de  $A$  juste avant la mesure  $ii$ ), alors dans ce même état le résultat de mesure de l'autre grandeur  $B$  n'est pas prévisible à coup sûr mais se situe parmi un spectre de valeurs possibles.

La certitude d'un résultat de mesure de  $A$  est incompatible avec la certitude d'un résultat de mesure de  $B$  et inversement.

..... sauf si les bases  $\varphi_n$  et  $\phi_v$  sont confondues :  $\{\varphi_n\} = \{\phi_v\}$

Dans ce cas les deux grandeurs physiques sont dites compatibles.

Considérons le cas où le spectre de fonctions propres de  $\hat{A}$  est identique à celui de  $\hat{B}$ .

Il vient:

$$\hat{A} \varphi_n = a_n \varphi_n \quad \text{et} \quad \hat{B} \varphi_n = b_n \varphi_n$$

Si lors d'une première mesure de  $A$  on trouve  $a_p$  par hasard, lors d'une mesure de  $B$  immédiatement postérieure, on trouve à coup sûr  $b_p$  valeur propre de  $\hat{B}$  pour la fonction propre  $\varphi_p$ .

Lorsque le système est dans un état décrit par la fonction d'onde  $\varphi_p$ , les résultats de mesure de  $A$  et de  $B$  sont prévisibles à coup sûr.

La condition mathématique pour que deux opérateurs présentent un spectre de fonctions propres communes est que ces opérateurs commutent:

$$\hat{A} \hat{B} = \hat{B} \hat{A}$$

On dit aussi que le commutateur :  $\hat{C} = [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}$  doit être nul.

## **II Mesures des composantes du moment cinétique d'un atome**

Illustrons l'incompatibilité de résultats de mesure à coup sûr de certaines grandeurs  $A$  et de  $B$  avec les grandeurs physiques "composantes du moment cinétique".

### II-1 Moment cinétique et moment magnétique

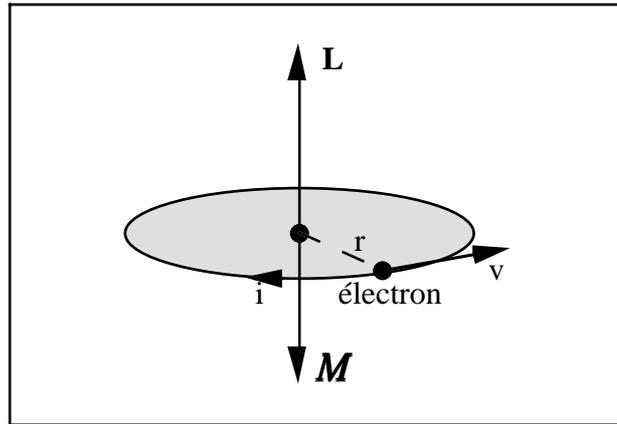
#### *Moment magnétique orbital*

Considérons dans une image classique un électron de charge  $q = -e$  et de masse  $m$  en rotation sur son orbite.

Un électron décrivant une orbite (figure 1) est une charge en mouvement. C'est donc une boucle de courant d'intensité  $i$ .

$$i = \frac{dq}{dt} = \frac{q}{\tau} = \frac{\omega q}{2\pi}$$

où  $\tau$  est le temps d'une révolution et  $\omega$  la vitesse angulaire.



*Figure 1: Moment cinétique et moment magnétique d'un atome décrivant une orbite*

Or une boucle de courant est un dipôle magnétique de moment  $\mathbf{M} = i \mathbf{S}$  où  $\mathbf{S}$  est la surface de la boucle.

Soit en tenant compte de la relation entre la surface  $\mathbf{S}$  de l'orbite circulaire et du rayon  $r$ :

$$M = i S = \frac{\omega q}{2\pi} \pi r^2 = q \frac{\omega r^2}{2}$$

#### Moment cinétique orbital

Un électron décrivant une orbite est aussi une masse  $m_e$  en mouvement circulaire se déplaçant à la vitesse  $v$ . C'est donc un moment cinétique  $\mathbf{L}$ .

$$L = p r = m_e v r = m_e \omega r^2$$

#### Rapport gyromagnétique

Compte tenu de leurs expressions, le rapport entre le moment magnétique et le moment cinétique s'écrit:

$$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{L}} = \frac{-|e|}{2 m_e} = \gamma$$

Ces deux grandeurs sont liées par une relation de proportionnalité simple où le coefficient de proportionnalité  $\gamma$  est appelé facteur gyromagnétique.

Pour une charge négative, ce rapport est négatif car le courant électrique s'écoule en sens contraire de la vitesse de déplacement de la masse.

#### Généralisation

De façon générale, une particule (atome, électron, proton etc...) présente un moment magnétique  $\mathbf{M}$  et un moment cinétique  $\mathbf{L}$ . Les moments cinétiques et magnétiques sont liés par la relation:

$$\frac{\mathbf{M}}{\mathbf{L}} = \gamma$$

Où le rapport gyromagnétique dépend de la structure interne des particules.

Nous verrons avec l'introduction du spin de l'électron comment le moment cinétique est généralisé.

Pour le propos de ce chapitre tourné vers le principe de la mesure, nous retenons le moment cinétique  $\mathbf{L}$ , le moment magnétique  $\mathbf{M}$  et le facteur  $\gamma$  qui les sépare.

## II-2 Montage expérimental de Stern et Gerlach

L'objectif de cette expérience est la mesure du moment cinétique  $\mathbf{L}$  via le moment magnétique  $\mathbf{M}$ .

Un faisceau de particules neutres, portant chacune un moment cinétique  $\mathbf{L}$  auquel est lié un moment magnétique  $\mathbf{M}$  par le biais du rapport gyromagnétique  $\gamma$  est dirigé entre les pôles d'un électro-aimant au sein duquel règne un gradient de champ magnétique  $\frac{\partial B_z}{\partial z}$  dirigé suivant l'axe Oz.

En vertu des résultats de la magnétostatique, les particules se trouvent soumises entre les pôles de l'électro-aimant à une force dont la composante  $F_z$  suivant la direction du gradient de champ magnétique est égale à  $F_z = M_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$ .

On montre facilement que si  $v$  est la vitesse incidente de l'atome de masse  $M$ ,  $d$  la longueur du parcours de la particule dans l'entrefer et  $D$  la distance séparant le centre de l'électroaimant d'un écran  $E$ , la particule atteint l'écran en un point situé à la cote  $Z$  donnée

$$\text{par: } Z = M_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{d D}{M v^2}.$$

Le coefficient  $\frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{d D}{M v^2}$  étant un coefficient à la disposition de l'expérimentateur, la mesure de  $Z$  s'avère être une mesure de  $M_z$  et finalement de  $L_z$ .

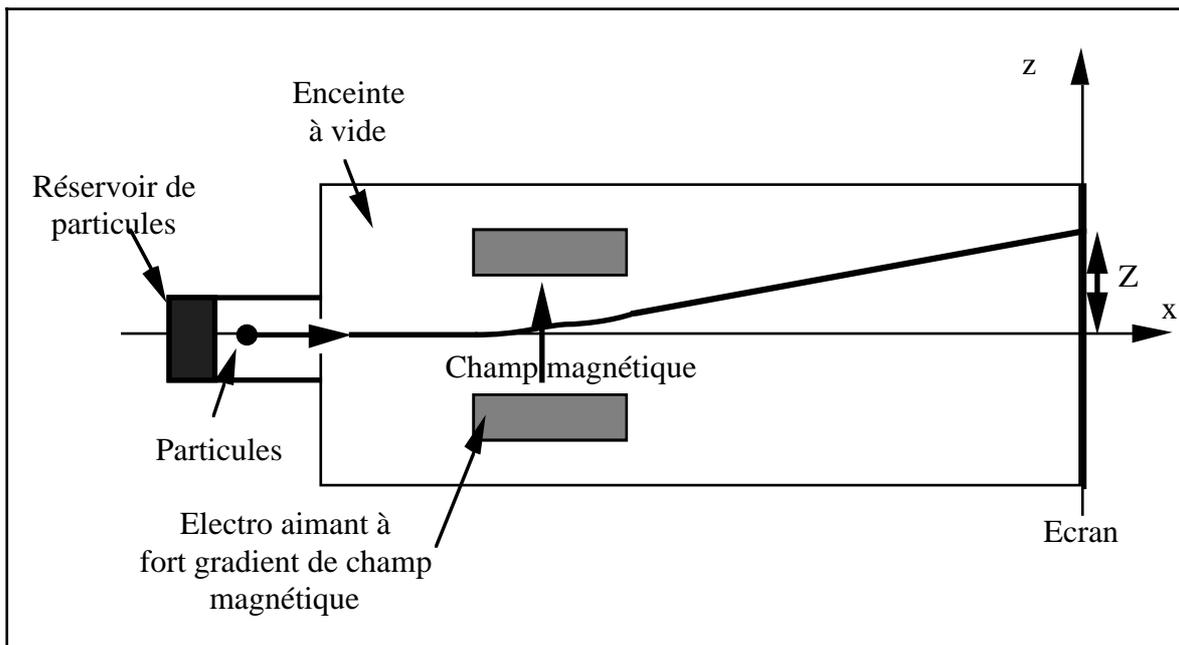


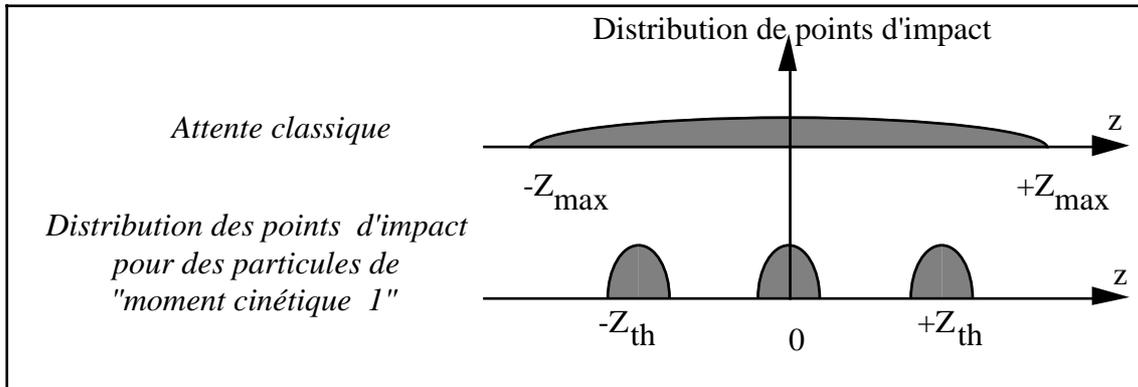
Figure 2: Appareil de Stern et Gerlach

## II-3 Résultat de mesure

### *Attente classique*

Si la particule porte un moment cinétique  $\mathbf{L}$ , sa composante  $L_z$  est classiquement comprise entre  $-|\mathbf{L}|$  et  $+|\mathbf{L}|$ . En effet dans le jet de particules, les directions de  $\mathbf{L}$  sont aléatoires et sur une population grande, la composante  $L_z$  se distribue de façon continue entre les deux valeurs extrêmes.

On attend donc sur l'écran une distribution continue de points d'impact entre  $\pm Z_{\max}$ , où  $Z_{\max} = \gamma |L| \frac{\partial B_z}{\partial z} \frac{dD}{M v^2}$ .



*Figure 2 : Résultat de mesure avec des particules de "moment cinétique 1"*

Résultat de mesure de  $L_z$  de particules de "moment cinétique 1"

Si les particules sont de "moment cinétique 1" (cette classe de particules sera précisée plus tard) les points d'impact forment trois taches bien distinctes:

- l'une au centre de l'écran
- les autres symétriques par rapport à l'origine en des valeurs  $+Z_{th}$  et  $-Z_{th}$ .

Cela signifie que  $M_z$  et donc  $L_z$  ne peuvent prendre que des valeurs particulières. Le nombre de taches et l'espacement entre les taches indiquent que le résultat de la mesure de  $L_z$  ne peut prendre que trois valeurs  $+\hbar$ ,  $0$  et  $-\hbar$ .  $L_z$  est donc quantifié.

Notons que ces résultats rejoignent la condition de quantification du moment cinétique introduite pour rendre compte des niveaux d'énergie de l'atome de Bohr.

De façon générale, pour des particules de moment cinétique  $j$ , les impacts se répartissent en  $2j+1$  taches distinctes, symétriques par rapport à l'origine.

Comme dans l'expérience des fentes d'Young Si on envoie une particule, elle se manifeste par un point d'impact situé en  $-Z_{th}$ ,  $+Z_{th}$  ou  $0$ .

De façon générale, le point d'impact n'est pas prévisible à coup sûr mais l'est seulement en terme probabiliste.

Résultat de mesure de  $L_y$  de particules de "moment cinétique 1"

Plutôt que de diriger les particules entre les pôles d'un électroaimant au sein duquel règne un gradient de champ magnétique orienté suivant  $Oz$ , on peut diriger les particules entre les pôles d'un électroaimant au sein duquel règne un gradient de champ magnétique orienté suivant  $Oy$ .

Il suffit pour cela de tourner l'appareil de mesure de  $90^\circ$ .

Comme précédemment, trois taches bien distinctes sont observées en  $+Y_{th}$  et  $-Y_{th}$ .

L'espacement des taches est identique à celui observé lors de la mesure de  $L_z$ , ce qui signifie que  $L_y$  est quantifié et ne peut prendre que trois valeurs  $+\hbar$ ,  $0$  et  $-\hbar$ .

Il en est de même pour  $L_x$

## II-4 L'appareil modifié.

Imaginons l'appareil de la figure 4:

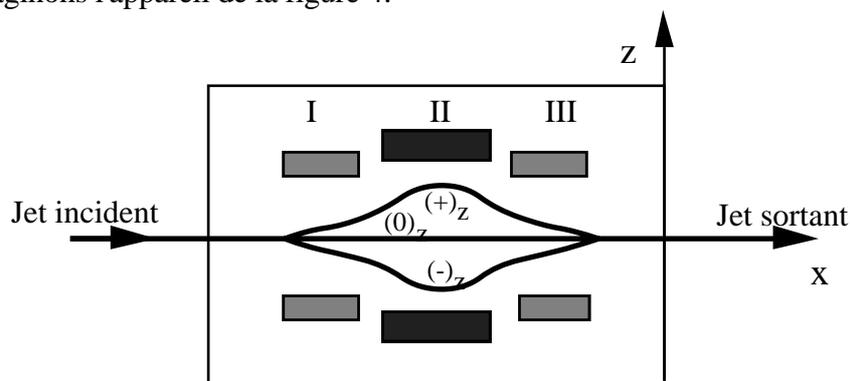


Figure 4: Appareil de Stern et Gerlach modifié.

il est composé de trois parties:

Dans la zone I le gradient de champ magnétique est dirigé vers le haut et les particules sont déviées comme précédemment. A celles qui sont déviées vers le haut correspond une composante de quantité de moment cinétique  $L_z = +\hbar$ . Aux particules déviées vers le bas correspond  $L_z = -\hbar$  et aux particules non déviées,  $L_z = 0$ .

Dans la zone II, le gradient de champ magnétique est dirigé vers le bas. Chacune des particules subit une force opposée à celle à laquelle elle était soumise en I. Elle est ramenée vers l'axe central.

Dans la zone III, le gradient est dirigé comme dans I de façon à amortir le retour des particules vers l'axe central et faire en sorte qu'elles quittent l'appareil de Stern et Gerlach modifié avec une vitesse dirigée suivant l'axe  $Ox$ .

On notera  $(+)_z$  le canal situé vers le haut,  $(0)_z$  le canal central et  $(-)_z$  le canal situé vers le bas.

L'indice  $z$  est là pour rappeler que le gradient de champ magnétique est dirigé suivant l'axe  $Oz$ .

## II-5 L'appareil de Stern et Gerlach modifié, instrument de mesure

### Une première mesure de $\mathcal{L}_z$

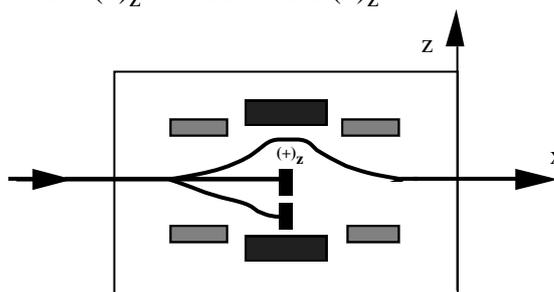
Imaginons qu'une particule pénètre dans un tel appareil. Elle ressort dans la direction  $Ox$ , sans que l'on puisse dire quelle est la composante de son moment cinétique puisque quelle que soit celle-ci, la particule sort suivant la même direction.

Il n'est pas possible de dire quel canal a suivi la particule en dehors d'une mesure.

Une manière de procéder consiste à disposer des écrans sur les canaux explorés par les particules. Plaçons un cache sur le canal  $(0)_z$  et sur le canal  $(-)_z$ .

Figure 5:

Tri des particules sur lesquelles on a trouvé  $L_z = +\hbar$



Dans ces conditions, toutes les particules ayant pénétré dans l'appareil ne ressortent pas.

Mais on peut dire que sur toutes celles qui ressortent, on a trouvé le moment cinétique  $+\hbar$ .

*Une seconde mesure de  $\mathcal{L}_z$*

Plaçons derrière le premier appareil dont les canaux  $(0)_z$  et  $(-)_z$  sont obstrués un second appareil orienté suivant la même direction  $0z$ .

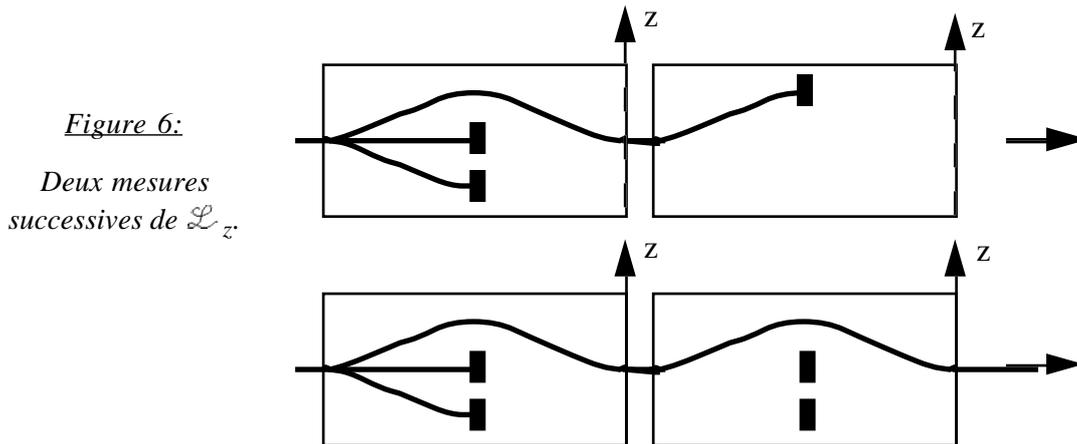
Disposons des caches sur les différents canaux du second appareil.

Après avoir réalisé toutes les combinaisons de cache, il apparaît que seule la présence d'un cache sur le trajet supérieur est suivi d' effet:

Si un cache est disposé sur le canal  $(+)_z$  aucune particule ne ressort du second l'appareil.

S'il n'y a pas de cache sur ce trajet  $(+)_z$  toutes les particules ayant pénétré dans le second appareil en ressortent.

Cela montre bien que si le résultat de la première mesure de  $\mathcal{L}_z$  est  $+\hbar$ , le résultat d'une seconde mesure de  $\mathcal{L}_z$  est de nouveau  $+\hbar$  à coup sûr.

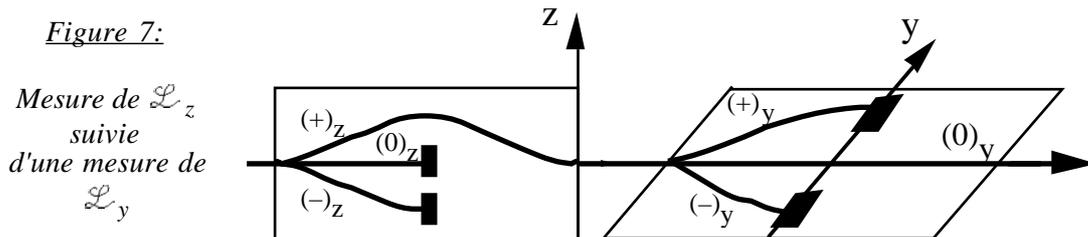


On peut continuer ainsi en plaçant un troisième appareil orienté suivant  $0z$  derrière les deux premiers.

*Mesure de  $\mathcal{L}_z$  suivie d'une mesure de  $\mathcal{L}_y$*

Pour mesurer  $\mathcal{L}_y$ , il suffit de tourner l'appareil de  $90^\circ$  et de placer l'axe du gradient de champ magnétique suivant  $0y$ .

Plaçons un tel appareil en aval d'un appareil dirigé suivant  $0z$  et sur lequel on a obstrué les canaux  $(0)_z$  et  $(-)_z$ .



On observe que le rapport entre le nombre d'atomes quittant l'appareil dirigé suivant  $Oy$  et le nombre d'atomes pénétrant dans cet appareil est de:

1/4 si on laisse non obstrué le seul canal  $(+)y$  correspondant à un résultat de mesure de  $\mathcal{L}_y$  égale à  $+\hbar$

1/4 si on laisse non obstrué le seul canal  $(-)y$  correspondant à un résultat de mesure de  $\mathcal{L}_y$  égale à  $-\hbar$

1/2 si seul le canal central  $(0)_y$  est libre.

Bien comprendre que un atome quittant le premier appareil a une probabilité de traverser le second appareil égale à :

1/4 si on laisse non obstrué le seul canal  $(+)y$

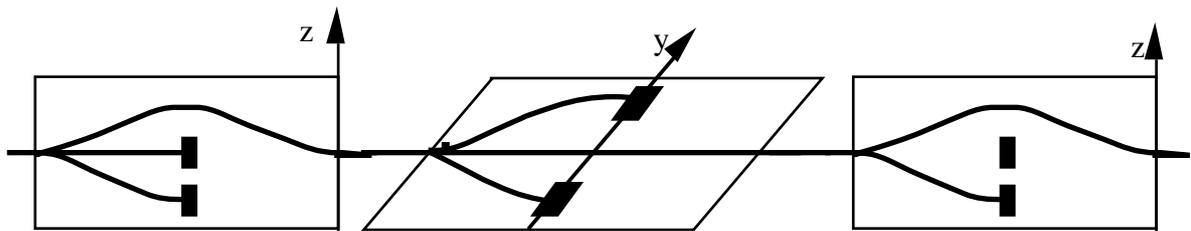
1/4 si on laisse non obstrué le seul canal  $(-)y$

1/2 si seul le canal central  $(0)_y$  est libre.

### Une nouvelle mesure de $\mathcal{L}_z$

Ajoutons à la configuration précédente un troisième appareil orienté de nouveau suivant l'axe  $Oz$ .

Les canaux  $(0)_z$  et  $(-)z$  du premier appareil et  $(+)y$  et  $(-)y$  du second appareil sont obstrués.



*Figure 8: Mesures successives de  $\mathcal{L}_z$  puis  $\mathcal{L}_y$  puis de nouveau  $\mathcal{L}_z$*

Effectuons de nouveau le rapport entre le nombre de particules quittant le troisième appareil et le nombre de particules pénétrant dans cet appareil.

Ce rapport est de;

1/2 si seul le canal  $(+)z$  du troisième appareil est libre.

1/2 si seul le canal  $(-)z$  du troisième appareil est libre.

0 si seul le canal  $(0)_z$  du troisième appareil est libre.

Ce n'est pas parce que le résultat de mesure de  $\mathcal{L}_z$  des particules quittant le premier est  $+\hbar$ , que le résultat de mesure prévisible de  $\mathcal{L}_z$  des particules atteignant le troisième appareil est à coup sûr  $+\hbar$ .

Il y a eu, entre les deux mesures de  $\mathcal{L}_z$ , une mesure de  $\mathcal{L}_y$  qui est venue redistribuer les probabilités de résultat de mesure.

Pour que le résultat de mesure de  $\mathcal{L}_z$  par le troisième appareil, il faudrait retirer le second appareil (comme à la figure 6) ou, ce qui revient au même, n'y placer aucun cache, c'est à dire ne pas effectuer de mesure de  $\mathcal{L}_y$ .

## II-6 Conséquence mathématique

à  $\mathcal{L}_z$  correspond un opérateur  $\widehat{L}_z$  dont les valeurs propres sont  $+\hbar$ ,  $0$  et  $-\hbar$

à  $\mathcal{L}_y$  correspond un opérateur  $\widehat{L}_y$  dont les valeurs propres sont aussi  $+\hbar$ ,  $0$  et  $-\hbar$

Mais les fonctions propres de l'un des opérateurs ne sont pas fonctions propres de l'autre. En d'autre terme, les opérateurs ne sont pas diagonalisables simultanément.

On peut montrer par exemple que dans la base où  $\widehat{L}_z$  est diagonal, on a :

$$\widehat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \widehat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad \widehat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Vous pouvez vérifier que l'expression de ces matrices est compatible avec les distributions de résultats de mesure observés plus haut.

Notez aussi que ces matrices, représentations d'opérateurs associés à des grandeurs physiques sont hermitiennes.

## III Les relations d'Heisenberg

### III-1 Position du problème

Considérons un système décrit à l'instant  $t_0$  par une fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ . On se propose de comparer les distributions de résultat de mesure de  $A$  et de  $B$ .

Insistons bien sur le fait qu'il s'agit de distributions de résultats de mesures effectuées à l'instant  $t_0$  sur une assemblée de particules, toutes décrites avant chaque mesure par la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ .

Les opérateurs associés aux grandeurs physiques  $A$  et  $B$ , sont  $\widehat{A}$  et  $\widehat{B}$  tels que:

$$\widehat{A} \varphi_n = a_n \varphi_n \quad \widehat{B} \phi_v = b_v \phi_v$$

et  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  s'écrit:

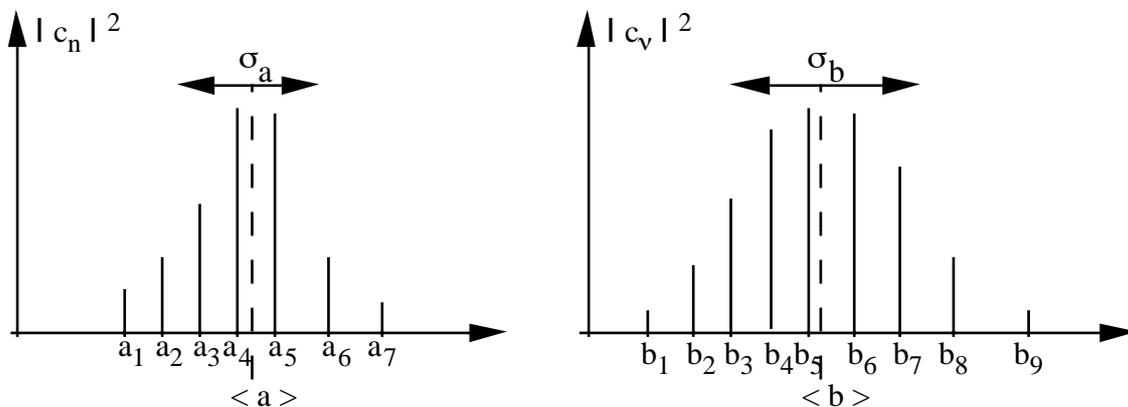
$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_n c_n \varphi_n(\mathbf{r}) \quad \text{ou} \quad \psi(\mathbf{r}, t_0) = \sum_v c_v \phi_v(\mathbf{r})$$

Si le système est décrit par  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$ ,

le résultat de la mesure de  $A$  est  $a_n$  avec la probabilité  $|c_n|^2$

celui de  $B$  est  $b_v$  avec la probabilité  $|c_v|^2$ .

$|c_n|^2$  et  $|c_v|^2$  sont des lois de distribution statistique des  $a_n$  et  $b_v$ .



*Figure 9: Distribution des résultats de mesures de  $A$  et de  $B$ , effectuées sur une assemblée de particules toutes décrites par la même fonction d'onde*

Elles sont caractérisées par les valeurs moyennes:

$$\langle a \rangle = \langle \hat{\mathbf{A}} \rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \quad \text{et} \quad \langle b \rangle = \langle \hat{\mathbf{B}} \rangle = \sum_v |c_v|^2 b_v$$

Et les écarts quadratiques moyens:

$$\sigma_a = \sqrt{\langle (\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle)^2 \rangle} \quad \text{et} \quad \sigma_b = \sqrt{\langle (\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{I}} \langle b \rangle)^2 \rangle}$$

Les écarts quadratiques moyens représentent les étalements des résultats de mesures prévisibles de  $A$  et de  $B$ .

Notre objectif est d'établir une relation générale liant  $\sigma_a$  et  $\sigma_b$ .

### III-2 Distribution des résultats de mesure

Pour cela introduisons les opérateurs  $\hat{\mathbf{A}}' = \hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle$  et  $\hat{\mathbf{B}}' = \hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{I}} \langle b \rangle$ . Ce sont comme  $\hat{\mathbf{A}}$  et  $\hat{\mathbf{B}}$  des opérateurs hermitiens

Calculons:

$$\langle \psi | \hat{\mathbf{A}}' \hat{\mathbf{A}}' \psi \rangle = \langle \psi | (\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle) (\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle) \psi \rangle$$

Pour cela, décomposons  $\psi$  dans la base des  $\varphi_n$ :  $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$  et remplaçons  $\psi$  par sa décomposition:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{\mathbf{A}}' \hat{\mathbf{A}}' \psi \rangle &= \left\langle \sum_m c_m \varphi_m \middle| (\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle) (\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle) \sum_n c_n \varphi_n \right\rangle \\ &= \sum_n |c_n|^2 (a_n - \langle a \rangle)^2 = \langle (\hat{\mathbf{A}} - \langle a \rangle)^2 \rangle \end{aligned}$$

La valeur moyenne de l'opérateur  $\hat{\mathbf{A}}' \hat{\mathbf{A}}'$  dans l'état  $\psi$  est égale au carré de l'écart quadratique moyen de la distribution des résultats de mesure lorsque le système est décrit par cette fonction d'onde.

Cela se caractérise par  $\sigma_a$  et  $\sigma_b$  tels que:

$$\sigma_a^2 = \langle (\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{I}} \langle a \rangle)^2 \rangle \quad \text{et} \quad \sigma_b^2 = \langle (\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{I}} \langle b \rangle)^2 \rangle$$

$$\sigma_a^2 = \langle \psi | \hat{\mathbf{A}}' \hat{\mathbf{A}}' \psi \rangle \quad \text{et} \quad \sigma_b^2 = \langle \psi | \hat{\mathbf{B}}' \hat{\mathbf{B}}' \psi \rangle$$

### III-2 Couple position-quantité de mouvement

En étudiant le paquet d'onde, nous avons vu que si le résultat de la mesure de  $P_x$  est prévisible à coup sûr (le paquet d'ondes se réduisant à une seule sinusoïde infinie), celui de  $X$  est totalement imprévisible puisque chaque résultat de position peut être trouvé avec la même probabilité.

A l'opposé si le résultat de la mesure de  $X$ , la composante de la position suivant  $Ox$ , est prévisible à coup sûr, celui de  $P_x$ , la composante de la quantité de mouvement selon la même direction est totalement imprévisible.

De façon générale, il est apparu que si  $X$  était prévisible avec une incertitude  $\Delta x = \sigma_x$  (écart quadratique moyen de  $x$ ),  $P_x$  l'était avec une incertitude  $\Delta p_x = \sigma_{p_x}$  (écart quadratique moyen de  $P_x$ ) tel que:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

Au vu de la discussion ci dessus, cela signifierait que les opérateurs associés à  $X$  et à  $P_x$  ne commutent pas.

Calculons ce commutateur  $[\widehat{X}, \widehat{P}_x]$

Nous savons que:

$$\widehat{X} \psi = x \psi \qquad \widehat{P}_x \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$$

En conséquence:

$$\widehat{X} \widehat{P}_x \psi = \frac{\hbar}{i} x \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} \qquad \widehat{P}_x \widehat{X} \psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial (x \cdot \psi)}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \left( x \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \right)$$

Soit::

$$[\widehat{X}, \widehat{P}_x] \psi = \widehat{X} \widehat{P}_x \psi - \widehat{P}_x \widehat{X} \psi = i \hbar \psi$$

Et finalement

$$[\widehat{X}, \widehat{P}_x] = i \hbar$$

Les opérateurs  $\widehat{X}$  et  $\widehat{P}_x$  font partie d'une classe d'opérateurs dits "conjugués" dont le commutateur vaut  $i\hbar$ .

Examinons les conséquences sur les distributions de résultats de mesure prévisibles effectuées sur les grandeurs physiques dont les opérateurs associés obéissent à cette relation de commutation.

### III-4 Relations d'Heisenberg

Tout d'abord il est facile de vérifier que si:

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = i \hbar$$

alors:

$$[\widehat{A}', \widehat{B}'] = i \hbar$$

Considérons maintenant la fonction

$$\chi = (\widehat{A}' + i\lambda \widehat{B}') \psi$$

Le produit scalaire:  $\langle \chi | \chi \rangle$  est positif ou nul quel que soit le réel  $\lambda$ , car c'est le carré de la norme de la fonction  $\chi$ .

Soit:

$$\langle (\widehat{A}' + i\lambda \widehat{B}') \psi | (\widehat{A}' + i\lambda \widehat{B}') \psi \rangle \geq 0$$

D'autre part, puisque  $\widehat{A}'$  et  $\widehat{B}'$  sont hermitiens  $(\widehat{A}' - i\lambda \widehat{B}')$  et  $(\widehat{A}' + i\lambda \widehat{B}')$  sont adjoints l'un de l'autre. L'expression ci dessus s'écrit donc aussi:

$$\langle \psi | (\widehat{A}' - i\lambda \widehat{B}') (\widehat{A}' + i\lambda \widehat{B}') \psi \rangle \geq 0$$

Soit aussi en développant:

$$\langle \psi | \widehat{A}' \widehat{A}' \psi \rangle + \lambda^2 \langle \psi | \widehat{B}' \widehat{B}' \psi \rangle + i\lambda \langle \psi | (\widehat{A}' \widehat{B}' - \widehat{B}' \widehat{A}') \psi \rangle \geq 0$$

Qui s'écrit:

$$\lambda^2 \sigma_B^2 - \hbar \lambda + \sigma_A^2 \geq 0$$

Il s'agit d'un polynôme du second degré en  $\lambda$ . Les coefficients  $\sigma_A^2$  et  $\sigma_B^2$  étant positifs, le polynôme est positif si le discriminant est lui même positif, soit:

$$\hbar^2 - 4 \sigma_A^2 \sigma_B^2 \leq 0 \quad \text{ou} \quad \sigma_A \sigma_B \geq \frac{\hbar}{2}$$

Que l'on note aussi:

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{\hbar}{2}$$

Il s'agit de la relation générale d'Heisenberg.

Plus les résultats de mesures prévisibles de  $A$  sont ramassés autour de leur valeur moyenne, plus ceux de  $B$  sont étalés.

Le produit des écarts quadratiques moyens est supérieur à  $\frac{\hbar}{2}$ .

#### **IV Les ensembles complets d'observables qui commutent**

##### IV-1 Notion d'observable

Dans un espace de dimension finie les fonctions propres de tout opérateur hermitien forment une base.

Cela n'est plus nécessairement vrai dans un espace de dimension infinie.

Un opérateur hermitien (agissant dans un espace de dimension infinie) dont les fonctions propres forment une base s'appelle une observable.

Les opérateurs associés aux grandeurs physiques sont des observables.

##### IV-2 Dégénérescence

Considérons une grandeur physique  $A$  et l'opérateur associé  $\hat{A}$ . On dit que la valeur propre  $a_n$  de  $\hat{A}$  est  $g_n$  fois dégénérée si  $g_n$  fonctions linéairement indépendantes  $\varphi_n^i$  sont fonctions propres de  $\hat{A}$  pour la même valeur propre  $a_n$ . ( $n = 1, 2, \dots$ ,  $i = 1, 2, \dots, g_n$ )

En d'autre termes, à la valeur propre  $a_n$  est associée un sous-espace propre  $\mathcal{F}(n)$  de dimension  $g_n$ .

En représentation matricielle,  
Les sous espaces propres  
apparaissent en grisé

$$\hat{A} = \left( \begin{array}{cc|ccc} a_1 & 0 & & & \\ 0 & a_1 & & & \\ \hline & & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & & 0 & a_2 & 0 \\ & & 0 & 0 & a_2 \end{array} \right)$$

##### IV-2 Rappel mathématique

Si deux opérateurs hermitiens  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent, les seuls éléments de matrice non nuls de l'un sont situés dans les blocs diagonaux sous-espaces propres de l'autre .

Si  $\hat{A}$  est diagonal,  $\hat{B}$  ne possède d'éléments non nuls que dans les blocs diagonaux grisés

$\hat{\mathbf{A}}$ est diagonal. Ses valeurs propres sont dégénérées	$\hat{\mathbf{B}}$ se présente a priori sous forme de blocs diagonaux	$\hat{\mathbf{B}}$ peut être diagonalisé bloc par bloc sans remettre en cause la diagonalisation de $\hat{\mathbf{A}}$
$\left( \begin{array}{cc cc} a_1 & 0 & & 0 \\ 0 & a_1 & & \\ \hline & & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & & 0 & a_2 & 0 \\ & & 0 & 0 & a_2 \end{array} \right)$	$\left( \begin{array}{cc cc} \blacksquare & & & 0 \\ & \blacksquare & & \\ \hline & & 0 & \\ 0 & & & \blacksquare \end{array} \right)$	$\left( \begin{array}{cc cc} b_1 & 0 & & \\ 0 & b_2 & & \\ \hline & & b_1 & 0 & 0 \\ & & 0 & b_1 & 0 \\ & & 0 & 0 & b_2 \end{array} \right)$

### IV-3 Diagonalisation commune

Un changement de base partiel dans chacun des blocs diagonaux, est une opération qui laisse invariant le sous espace propre de  $\hat{\mathbf{A}}$ .

Aussi est-il possible de diagonaliser  $\hat{\mathbf{B}}$  dans chacun des blocs et d'obtenir une base diagonalisant  $\hat{\mathbf{A}}$  et  $\hat{\mathbf{B}}$  simultanément.

### IV-4 Ensemble complet d'observables qui commutent

Après diagonalisation simultanée de  $\hat{\mathbf{A}}$  et de  $\hat{\mathbf{B}}$ , deux possibilités se présentent:

i) Il ne reste aucun sous espace propre (de dimension supérieure à 1) commun à  $\hat{\mathbf{A}}$  et à  $\hat{\mathbf{B}}$ . On dira alors que l'ensemble des opérateurs  $\hat{\mathbf{A}}$  et  $\hat{\mathbf{B}}$  forme un ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC)

ii) Il reste au moins un sous espace propre (de dimension supérieure à 1) commun à  $\hat{\mathbf{A}}$  et à  $\hat{\mathbf{B}}$ . Dans ce cas, il faut chercher une nouvelle observable  $\hat{\mathbf{C}}$  qui commute à la fois avec  $\hat{\mathbf{A}}$  et avec  $\hat{\mathbf{B}}$ . Cet opérateur n'a d'éléments de matrice que dans les sous espaces propres communs à  $\hat{\mathbf{A}}$  et à  $\hat{\mathbf{B}}$ .

On peut alors diagonaliser  $\hat{\mathbf{C}}$  à l'intérieur de chacun des sous espaces propres commun à  $\hat{\mathbf{A}}$  et à  $\hat{\mathbf{B}}$ .

Si à la suite de cette opération, il ne reste plus de sous espaces propres de dimension supérieure à 1 communs aux opérateurs  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\mathbf{B}}$  et  $\hat{\mathbf{C}}$ , ces opérateurs forment un ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC), sinon il faut introduire un opérateur  $\hat{\mathbf{D}}$  etc...

$\hat{\mathbf{A}}$ est diagonal les valeurs propres sont dégénérées	$\hat{\mathbf{B}}$ est diagonal les valeurs propres sont dégénérées	$\hat{\mathbf{C}}$ présente des éléments non nuls dans les sous espaces propres communs à $\hat{\mathbf{A}}$ et à $\hat{\mathbf{B}}$	$\hat{\mathbf{C}}$ peut être diagonalisé bloc par bloc sans remettre en cause la diagonalisation de $\hat{\mathbf{A}}$ et de $\hat{\mathbf{B}}$
$\left( \begin{array}{cc cc} a_1 & 0 & & 0 \\ 0 & a_1 & & \\ \hline & & a_2 & 0 & 0 \\ 0 & & 0 & a_2 & 0 \\ & & 0 & 0 & a_2 \end{array} \right)$	$\left( \begin{array}{cc cc} b_1 & 0 & & \\ 0 & b_2 & & \\ \hline & & b_1 & 0 & 0 \\ & & 0 & b_1 & 0 \\ & & 0 & 0 & b_2 \end{array} \right)$	$\left( \begin{array}{cc cc} \blacksquare & 0 & & \\ 0 & \blacksquare & & \\ \hline & & & & 0 \\ 0 & & & \blacksquare & \\ & & 0 & & \blacksquare \end{array} \right)$	$\left( \begin{array}{cc cc} c_1 & & & \\ & c_2 & & \\ \hline & & c_1 & & \\ & & & c_3 & \\ & & & & c_2 \end{array} \right)$

## V-Introduction à l'atome d'hydrogène

Vous avez étudié en chimie les nombres quantiques de l'atome d'hydrogène et les orbitales qui leurs sont associées.

Les orbitales sont des probabilités de présence de d'électron dans l'atome.

Ce sont des carrés de fonction d'onde.

On vous a appris les nombres quantiques  $n, \ell, m$  auxquels le spin a été ajouté. Ils sont organisés suivant le tableau ci dessous:

Nombre quantique principal $n$	Nombre quantique secondaire $\ell$	Nombre quantique magnétique $m$	Spin
1	0	0	↑ et ↓
2	0	0	↑ et ↓
	1	-1	↑ et ↓
		0	↑ et ↓
		+1	↑ et ↓
3	0	0	↑ et ↓
	1	-1	↑ et ↓
		0	↑ et ↓
		1	↑ et ↓
	2	-2	↑ et ↓
		-1	↑ et ↓
		etc...	↑ et ↓

Les  $(n, \ell, m)$  sont les indices des valeurs propres de trois observables qui commutent et forment un ECOC.

Ces opérateurs sont associées aux grandeurs physiques:

- Energie  $H$
- Carré du moment cinétique  $L^2$
- composante suivant un axe ( en général  $0z$ ) du moment cinétique :  $L_z$

Dont les opérateurs associés  $\widehat{H}$ ,  $\widehat{L}^2$  et  $\widehat{L}_z$  commutent 2 à 2

Il existe donc une base de fonctions propres  $\varphi_{n, \ell, m}(\mathbf{r})$  commune à ces opérateurs telle que:

$$\begin{aligned}\widehat{H} \varphi_{n, \ell, m} &= a_n \varphi_{n, \ell, m} \\ \widehat{L}^2 \varphi_{n, \ell, m} &= b_\ell \varphi_{n, \ell, m} \\ \widehat{L}_z \varphi_{n, \ell, m} &= c_m \varphi_{n, \ell, m}\end{aligned}$$

L'étude du moment cinétique au chapitre VI et de l'atome d'hydrogène au chapitre VIII montrent comment on parvient à ce résultat tout à fait spectaculaire qui a consacré définitivement la mécanique quantique.