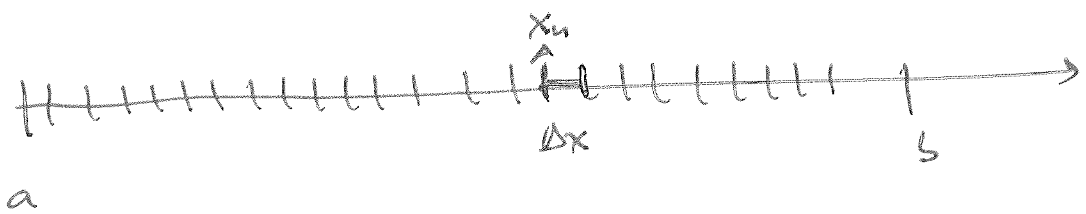
Dynamique d'une particule ponctuelle en MQ : position et impulsion

position $\longrightarrow x$

$x \rightarrow \hat{x}$ opérateur position $\begin{pmatrix} x_1 & & & & \\ & x_2 & & & \\ & & x_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & x_n \\ & & & & & \ddots \end{pmatrix}$?

infinité non dénombrable $\longleftrightarrow$ précision infinie sur x

observable x_n



Δx précision finie

$\Delta x \to 0 \Rightarrow$ infinité de nombrable de valeurs possibles

$x \in [-\infty, +\infty]$ $\Delta x > 0$ nombre infini de valeurs possibles

$|\tilde{x}_n\rangle$: $\hat{x}\,|\tilde{x}_n\rangle = x_n |\tilde{x}_n\rangle$ $\langle \tilde{x}_n | \tilde{x}_m\rangle = \delta_{nm}$ $\sum_n |\tilde{x}_n\rangle\langle\tilde{x}_n| = \hat{\mathbb{1}}$

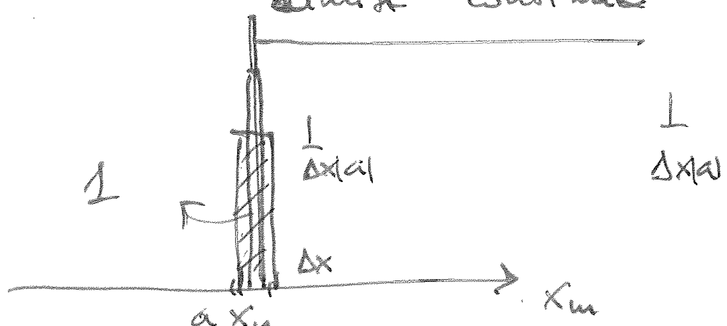
$|x_n\rangle = \dfrac{1}{(\Delta x)^{1/2}} |\tilde{x}_n\rangle$ $\langle x_n | x_m\rangle = \dfrac{\delta_{nm}}{\Delta x}$ $\Delta x \sum_n |x_n\rangle\langle x_n| = \mathbb{1}$

$\approx \int dx\, |x\rangle\langle x|$

limite continue

$\lim_{\Delta x \to 0} |x_n\rangle = |x\rangle$ $\langle x_n | x_m\rangle = \dfrac{\delta_{nm}}{\Delta x} \xrightarrow[\Delta x \to 0]{} \delta(x - x')$

$\lim |x_m\rangle = |x'\rangle$ δ de Dirac



δ de Dirac est une distribution

≠ fonction

$$\int_a^b dx\, f(x)\, \delta(x-x') = f(x')$$

$x' \in [a,b]$

$x' \notin [a,b] \qquad = 0$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x-x') = 1$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

$|\tilde{x}_n\rangle$:

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle \tilde{x}_n|\psi\rangle\, |\tilde{x}_n\rangle = \Delta x \sum_n \langle x_n|\psi\rangle\, |x_n\rangle \xrightarrow[\Delta x \to 0]{} \int dx\, \psi(x)\, |x\rangle$$

$$\psi_n = \langle x_n|\psi\rangle \xrightarrow[\Delta x \to 0]{} \psi(x) = \langle x|\psi\rangle$$ fonction d'onde

$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_{\Phi}$ $\qquad \Delta x \sum_n |x_n\rangle\langle x_n| = \mathbb{1}$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1 = \Delta x \sum_n \underbrace{\underset{\psi_n^*}{\langle\psi|x_n\rangle}\ \underset{\psi_n}{\langle x_n|\psi\rangle}}_{|\psi_n|^2} \xrightarrow[\Delta x \to 0]{} \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, |\psi(x)|^2$$

$\psi(x) \in \mathbb{C}$

$\psi(x) \in L^{(2)}[\mathbb{R}]$

$[a,b] \qquad \psi(x) \in L^{(2)}[a,b]$

$$|\psi_n|^2 = \frac{|\langle \tilde{x}_n|\psi\rangle|^2}{\Delta x}$$

$\boxed{\text{probabilité de trouver la particule en } \Delta x \text{ autour de } x_n}$

$\xrightarrow[\Delta x \to 0]{}$ $|\psi(x)|^2\, \Delta x = P(x, x+\Delta x)$

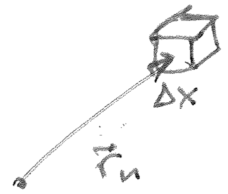
↓

densité de proba

= distribution de proba / densité de probabilité $\qquad |\psi_n|^2 \sim \frac{1}{\text{longueur}}$

fonction d'onde : onde d'amplitude de probabilité

<u>dimension</u> $d=1 \longrightarrow d=3 \quad |\tilde{\vec{r}}_n\rangle$



$\vec{r} = (x, y, z)$

$$|\vec{r}_n) = \frac{|\tilde{\vec{r}}_n\rangle}{(\Delta x)^{3/2}} \rightarrow |\vec{r}\rangle \qquad \psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle$$

$$\langle \vec{r}|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = \delta(x-x')\,\delta(y-y')\,\delta(z-z')$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r\, |\psi(\vec{r})|^2 = 1$$

<u>opérateur impulsion</u> $\hat{p}$ $\qquad m$ = masse de la particule

<u>énergie</u> $\qquad$ énergie potentielle

$$E(\vec{r}, \dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^{\,2} + V(\vec{r}) \qquad ; \quad \vec{p} = m\dot{\vec{r}}$$

$$= \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{r}) = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + V(x, y, z)$$

$\Longrightarrow$ opérateur Hamiltonien $\quad \hat{H}(\hat{\vec{x}}, \hat{\vec{p}}) = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{x}, \hat{z}]$
$= [\hat{y}, \hat{z}] = 0$

de même pour
$\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = ?$$

$$\widehat{\left(\frac{1}{x}\right)}$$

Théorème de Noether (méca classique et méca Q)

Symétrie $\Longleftrightarrow$ quantité conservée
↓
observable

Symétrie : transformation (de référentiel par exemple) qui laisse le dynamique du système inchangée.

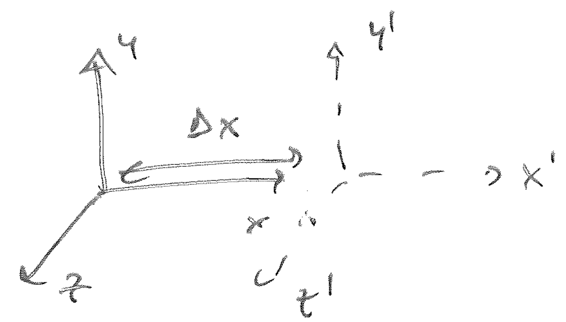
Impulsion conservée suivant x : méca classique

$$\dot{p}_x = 0 = F_x \qquad \dot{\vec{p}} = \vec{F}$$

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial x} V(\vec{r}) = 0 \qquad V(\vec{r}) = V(y,z)$$

$$E(\vec{r},\dot{\vec{r}}) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 + V(y,z)$$

Symétrie associée à la conservation de p_x ⟶ invariance par translation suivant x



$$\vec{r}' = (x', y', z') = (x - \Delta x, y, z)$$

$x' = x - \Delta x$ transformation $y' = y$, $z' = z$

$\dot{\vec{r}}' = \dot{\vec{r}}$ $\qquad \dot{x}' = \dot{x}$ $\qquad \dot{p}_x = m\ddot{x} = m\ddot{x}' = 0$

$$E(\vec{r},\dot{\vec{r}}) = E'(\vec{r}',\dot{\vec{r}}') = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}' + V(y',z') = E(\vec{r}',\dot{\vec{r}}')$$

invariance

Transformation physique en Méca Q

opérateur unitaire $\hat{U} = e^{i\phi\hat{A}}$ $\phi \in \mathbb{R}$ $\hat{A} = \hat{A}^+$

$\hat{U}$ symétrie du système $:\Leftrightarrow$ la dynamique reste inchangée suite à la transformation

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$$

si $|\psi\rangle$ est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$$

$\Leftrightarrow$ $|\psi'\rangle$ est aussi solution

$$i\hbar \frac{d}{dt}\hat{U}|\psi\rangle = \hat{H}\hat{U}|\psi\rangle$$

$\hat{U}$ indépendant du temps

$$\hat{U} i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}\underbrace{\hat{U}|\psi\rangle}_{|\psi'\rangle} = \hat{U}\underset{\hat{U}^+\hat{U}}{\hat{H}}|\psi\rangle = \underbrace{(\hat{U}\hat{H}\hat{U}^+)}_{\hat{H}'}\underbrace{\hat{U}|\psi\rangle}_{|\psi'\rangle}$$

$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+$ transformation unitaire de $\hat{H}$

$\hat{U}$ est symétrie du système $\Leftrightarrow$ $\hat{H}' = \hat{H}$

$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ = \hat{H}$ $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$

$\hat{U}\hat{H} = \hat{H}\hat{U}$ $\boxed{[\hat{H}, \hat{U}] = 0}$

$[\hat{H}, e^{i\phi\hat{A}}] = 0$ transformation infinitésimale $\phi \to 0$ $\hat{U} \simeq \mathbb{1} + i\phi\hat{A}$

$[\hat{H}, \hat{U}] \Rightarrow \boxed{[\hat{H}, \hat{A}] = 0}$

Si $\hat{U}$ est symétrie $\Rightarrow$ $\hat{A}$ commute avec $\hat{H}$

$\hat{A}$ indépendant du temps dans sa définition

$i\hbar \frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle_\psi = 0$ $\quad \underline{\langle\hat{A}\rangle_\psi = \text{const.}}$

$\hat{A}$ générateur infinitésimal des transformations $\hat{U}(\phi)$

$\underline{\hat{U}(\phi \to 0) \simeq \hat{\mathbb{1}} + i\phi\hat{A}}$

1) $\boxed{\vec{p} = m\vec{v}}$ 2) $\hat{U}$ transformation quelconque <u>unitaire</u>

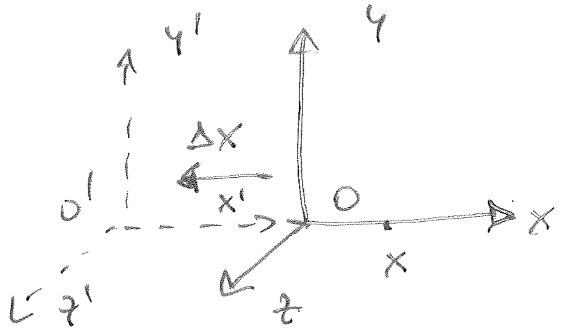
$[\hat{U}, \hat{H}] \Rightarrow H$ $\quad \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

Translation dans l'espace en 1 dimension spatiale $\qquad \hat{p} = \hat{p}_x$ $\qquad$ 7

Comme l'invariance par translation implique la conservation de l'impulsion $\Rightarrow$ $\underset{\text{translation}}{\hat{\tau}(\Delta x)|\psi\rangle}$: $\hat{\tau}(\Delta x) = e^{i\phi\hat{A}}$

$$= e^{i\phi(\Delta x)\hat{p}_x}$$

translation de $-\Delta x$



$$x' = x + \Delta x$$

$$\hat{\tau}(\Delta x \to 0) \simeq \mathbb{1} + i\Delta x(\quad)$$

$$\phi = -\frac{\Delta x}{\hbar} \qquad [x\,p_x] = [\hbar]$$

$$\boxed{\hat{\tau}(\Delta x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}_x}}$$

$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = \hat{\tau}(\Delta x)|\psi\rangle$$

$$\hat{x}^\dagger = \hat{x} \qquad \hat{p}_x^\dagger = \hat{p}_x$$

$$\langle\hat{x}\rangle_\psi \to \underline{\langle\hat{x}\rangle_{\psi'} = \langle\hat{x}\rangle_\psi + \Delta x}$$

$$\langle\psi'|\hat{x}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{\tau}^\dagger(\Delta x)\,\hat{x}\,\hat{\tau}(\Delta x)|\psi\rangle \underset{\Delta x\to 0}{\simeq} \langle\psi|\left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}_x\right)\hat{x}\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}_x\right)|\psi\rangle$$

$$= \underbrace{\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle}_{\langle\hat{x}\rangle_\psi} + \frac{i}{\hbar}\Delta x\,\langle\psi|(\hat{p}_x\hat{x} - \hat{x}\hat{p}_x)|\psi\rangle + \cancel{o(\Delta x^2)}$$

$$\forall\,\Delta x$$

$$= \langle\hat{x}\rangle_\psi + \Delta x\,\langle\hat{\mathbb{1}}\rangle_\psi \qquad 1 = \langle\hat{\mathbb{1}}\rangle_\psi$$

$-\frac{i}{\hbar}[\hat{x},\hat{p}_x] = \mathbb{1}$ $\qquad$ $\boxed{[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}}$

$[\hat{y},\hat{p}_y] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}$

$[\hat{z},\hat{p}_z] = i\hbar\hat{\mathbb{1}}$

$$\boxed{(\Delta x)_\psi (\Delta p_x)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle\psi|[\hat{x},\hat{p}_x]|\psi\rangle| = \frac{\hbar}{2}}$$

principe d'Heisenberg
position – impulsion

Représentation-x des opérateurs

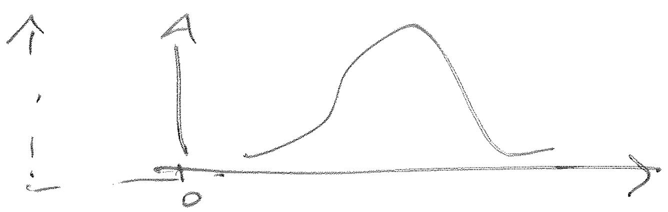
$\hat{A}|\psi\rangle$ $\qquad$ $\hat{A}$ linéaire

$\langle x|\hat{A}|\psi\rangle = \underbrace{A(x)}\,\psi(x)$ $\qquad$ $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$

opérateur dépendant de x
représentation-x de $\hat{A}$

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

$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle$



$\langle x|\hat{\tau}(\Delta x)|\psi\rangle = \psi(x-\Delta x) = \langle x|\psi'\rangle$ ..

$$\langle x|\hat{\tau}(\Delta x)|\psi\rangle = \langle x|\, e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}}\,|\psi\rangle \underset{\Delta x\to 0}{\simeq} \langle x|\left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\Delta x\,\hat{p}\right)|\psi\rangle$$

$$= \psi(x) - \frac{i}{\hbar}\Delta x\,\underbrace{\langle x|\hat{p}|\psi\rangle}$$

$$= \psi(x-\Delta x) \underset{\Delta x\to 0}{=} \psi(x) - \Delta x\,\frac{d\psi}{dx}$$

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

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

$\hat{x} \longrightarrow x$

$\hat{p} \rightarrow -i\hbar\frac{d}{dx}$

représentation x des opérateurs $\hat{x}$ et $\hat{p}$