PC 1 – Cours de physique - mécanique quantique – Xavier Blase

Relations d'incertitude en mécanique quantique. Les relations d'incertitude (ou d'indétermination) sont au coeur de la mécanique quantique. Nous allons les démontrer à partir des relations de commutation entre opérateurs, centrales elles aussi en MQ, et en déduire quelques conséquences concernant la stabilité de la matière.

1) Pour une observable A, on note: $a = \langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$, $\langle A^2 \rangle = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle$ et $\Delta a = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$. En considérant la norme au carré du vecteur $(\hat{A}' + i\lambda \hat{B}')|\psi\rangle$ ($|\psi\rangle$ quelconque normalisé, λ réel et $\hat{A}' = \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, idem pour $\hat{B}'$), démontrer que pour deux observables A et B:

$$\Delta a \Delta b \geq |\langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle| / 2$$

2) Montrer que: $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$ et que l'égalité est stricte si l'état $|\psi\rangle$ est gaussien (on parle de paquet d'onde minimum).

3) Que dire des vecteurs propres de $\hat{A}$ et $\hat{B}$ si ils commutent (on considerera des valeurs propres non dégénérées) ?

4) **Relations de commutation généralisées.** On considère une fonction réelle f(r) de la variable r=$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Montrer les relations de commutation suivantes:

$$[\hat{p}_x, f(\hat{r})] = -i\hbar \frac{\hat{x}}{\hat{r}} f'(\hat{r}) \quad \text{et:} \quad [\hat{p}_x, \hat{x} f(\hat{r})] = -i\hbar \left(f(\hat{r}) + \frac{\hat{x}^2}{\hat{r}} f'(\hat{r}) \right)$$

5) On considère l'opérateur $\hat{A}_x = \hat{p}_x + i\lambda \hat{x} f(\hat{r})$, où λ est un nombre réel.

- calculer le carré de la norme de $\hat{A}_x|\psi\rangle$, $|\psi\rangle$ quelconque normalisé.
- Ajouter les relations correspondantes pour $\hat{A}_y$ et $\hat{A}_z$; en déduire une inégalité reliant $\langle p^2 \rangle$, $\langle r^2 f^2 \rangle$, $\langle f \rangle$ et $\langle r f' \rangle$.

6) En considérant les choix f=1, f=1/r et f=$1/r^2$, démontrer les relations suivantes:

$$\langle p^2 \rangle \langle r^2 \rangle \geq 9\hbar^2/4 \quad \text{et:} \quad \langle p^2 \rangle \geq \hbar^2 \langle 1/r \rangle^2 \quad \text{et:} \quad \langle p^2 \rangle \geq \hbar^2 \langle 1/r^2 \rangle / 4$$

7) **Stabilité de la matière.** En déduire une borne inférieure pour (a) l'énergie de l'atome d'hydrogène et (b) l'énergie de l'oscillateur harmonique isotrope.

Complément. Systèmes à trois niveaux. Brisure spontanée de symétrie.

Cet exercice est une variation sur l'exercice 6.2 du cours (violet cristallisé et vert de malachite). Il permet de travailler sur la formulation matricielle de la mécanique quantique.

Considérons une molécule "en triangle" composée de trois unités semblables (chaque unité peut être un fragment de molécule comme pour le violet cristallisé, ou un seul atome comme dans un trimère de sodium). On suppose que les fonctions d'onde de ce système peuvent être décrites (dans la gamme d'énergie qui nous intéresse) comme une combinaison linéaire de trois orbitales ($|1>, |2>, |3>$) chacune localisée sur un des trois sites (état HOMO de chaque fragment, orbitale atomique $3s$ du sodium, etc.)

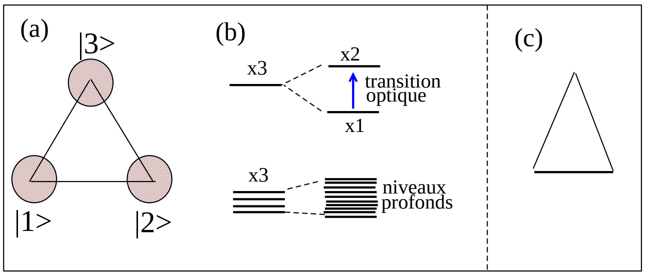
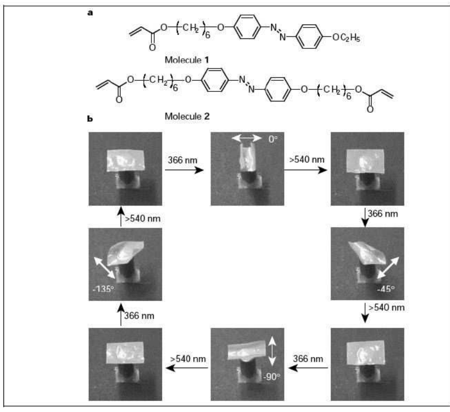


FIG. 1: (a) Molécule en triangle avec les trois états localisés $|1>, |2>, |3>$ considérés. (b) Niveaux d'énergie de la molécule avant (gauche) et après (droite) avoir "branché" le terme de couplage A. Les chiffres (x1,x2,x3) indiquent la dégénerescence des niveaux. (c) Distorsion avec raccourcissement de la liaison (1-2).

On choisit l'origine des énergies telle que l'on ait: $<1|\hat{H}|1> = <2|\hat{H}|2> = <3|\hat{H}|3> = 0$. La probabilité tunnel entre ces états se traduit par des termes "de saut" non-diagonaux pour la représentation matricielle de $\hat{H}$ dans cette base. On pose: $<2|\hat{H}|3> = <3|\hat{H}|1> = -A$ où A est réel. On va supposer que la liaison "1-2" est plus courte que les autres ce qui entraine une renormalisation du terme de saut: $<1|\hat{H}|2> = -B$, avec B=A+t (on prendra $t << A$).

1) Ecrire la matrice hamiltonienne H.
2) Trouver les valeurs propres de ce système.
3) On peut mettre deux électrons maximum par niveau d'énergie. Justifier que spontanément la molécule peut effectivement se déformer pour minimiser son énergie en racourcissant une liaison et que cette déformation peut changer sous irradiation lumineuse (voir figure).



Couplage opto-mécanique

Figure : sous l'effet d'une lumière polarisée, la feuille de polymères se plie dans un sens ou un autre (Yu, Nakano, Ikeda, Nature 2003)