Mécanique Quantique I, Corrigé 5

Assistants : joseph.saliba@epfl.ch & pierre.lugan@epfl.ch

Exercice 1 : États cohérents

Le but de cet exercice est de montrer que les états propres de l'opérateur d'annihilation a saturent le principe d'incertitude de Heisenberg : $\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \hbar/2$.

1. Commençons par écrire les états cohérent $|z\rangle$ satisfaisant $a|z\rangle = z|z\rangle$ comme une superposition des états propre du hamiltonien de l'oscillateur harmonique :

$$|z\rangle = \sum_n c_n|\varphi_n\rangle \tag{1}$$

Voyons quelle contrainte doivent satisfaire les coefficients c_n. Comme d'une part $|z\rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur a, on a :

$$a|z\rangle = z|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} z\, c_n|\varphi_n\rangle \tag{2}$$

D'autre part, si l'on applique l'opérateur a à l'état $|\varphi_n\rangle$, on obtient :

$$a|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n a|\varphi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1}\sqrt{n+1}|\varphi_n\rangle \tag{3}$$

Comme les vecteurs $|\varphi_n\rangle$ sont linéairement indépendants, les deux expressions doivent être identiques terme à terme, ce qui impose :

$$c_{n+1} = \frac{z}{\sqrt{n+1}}\, c_n \tag{4}$$

2. A partir de la relation de récurrence précédente, il est aisé d'exprimer c_n en fonction de z et c_0 :

$$\begin{aligned} c_n &= \frac{z}{\sqrt{n}}\, c_{n-1} && (5)\\ &= \frac{z}{\sqrt{n}}\frac{z}{\sqrt{n-1}}\, c_{n-2} && (6)\\ &= \dots && (7)\\ &= \frac{z^n}{\sqrt{n!}}\, c_0 && (8)\end{aligned}$$

Voyons maintenant que vaut le produit scalaire entre deux états cohérents de valeur propre z et z' : $\langle z|z'\rangle$. Ces deux états sont exprimés dans la base orthonormée $|\varphi_n\rangle$, avec leurs coefficients respectivement donnés par c_n et c'_n

$$\begin{aligned} \langle z|z'\rangle &= \left(\sum_m c_m^*\langle\varphi_m|\right)\left(\sum_n c'_n|\varphi_n\rangle\right) && (9)\\ &= \sum_{n,m} c_m^* c'_n\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c'_n\delta_{nm} = \sum_n c_n^*\, c'_n && (10)\\ &= \sum_n c_0^*\, c'_0\frac{(z^*)^n}{\sqrt{n!}}\,\frac{(z')^n}{\sqrt{n!}} = c_0^*\, c'_0\sum_n\frac{(z^*z')^n}{n!} && (11)\\ &= c_0^*\, c'_0 e^{z^*z'} && (12)\end{aligned}$$

En particulier, la norme d'un état cohérent est donc donnée par :

$$\langle z|z\rangle = |c_0|^2 e^{|z|^2} \tag{13}$$

On peut dès lors choisir c_0 de telle manière à ce que $\langle z|z\rangle = 1$:

$$|c_0|^2 e^{|z|^2} = 1 \qquad \rightarrow \qquad c_0 = e^{i\theta} e^{-|z|^2/2} \tag{14}$$

Les fonctions d'onde étant toujours définies à un coefficient $e^{i\theta}$ près, qui ne change rien à la physique du problème, nous pouvons donc choisir $e^{i\theta} = 1$. Les états cohérents satisfont donc :

$$\boxed{|z\rangle = \sum_n e^{-|z|^2/2} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |\varphi_n\rangle \qquad \text{et} \qquad \langle z|z'\rangle = e^{-|z|^2/2 - |z'|^2/2} e^{z^* z'}} \tag{15}$$

Les vecteurs d'état $|z\rangle$ ne sont donc pas orthogonaux. Si $z = 0$, alors seul c_0 est non-nul : $c_n = \delta_{n0}$. On trouve donc que $|0\rangle = |\varphi_0\rangle$ correspond à l'état fondamental du système.

3. Sachant que les états $|\varphi_n\rangle$ sont des états propres du hamiltonien, on obtient :

$$H|z\rangle = \sum_n c_n E_n |\varphi_n\rangle \neq \epsilon|z\rangle \quad \text{dès que } z \neq 0 \tag{16}$$

puisque les énergies E_n ne sont pas dégénérées. La probabilité de mesurer E_n est donc donnée par la projection de $|z\rangle$ sur $|\varphi_n\rangle$:

$$P(E_n) = |\langle\varphi_n|z\rangle|^2 = |\langle\varphi_n| \sum_m c_m |\varphi_m\rangle|^2 = |c_n|^2 = \frac{|z|^{2n}}{n!} e^{-|z|^2} \tag{17}$$

Il s'agit d'une loi de Poisson de paramètre $|z|^2$: sachant que la moyenne du nombre d'excitations est donnée par $|z|^2$, alors la probabilité d'en observer exactement n est donnée par $P(E_n)$. Rappelons que $|z|^2$ est bien la moyenne du nombre d'excitations dans l'état $|z\rangle$: $\langle z|a^\dagger a|z\rangle = |z|^2$.

4. Calculons maintenant les valeurs moyennes des opérateurs $\hat{x}$, $\hat{p}$ et $\hat{H}$ dans un état cohérent. Rappelons que ces derniers sont reliés aux opérateur de création et d'annihilation par les relations suivantes :

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a^\dagger + a\right) \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left(a^\dagger - a\right) \qquad \hat{H} = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{18}$$

Il nous faut donc dans un premier temps évaluer : $\langle a\rangle$, $\langle a^\dagger\rangle$ et $\langle a^\dagger a\rangle$. Nous avons par définition que $a|z\rangle = z|z\rangle$, on obtient donc $\langle z|a^\dagger = \langle z|z^*$. Les moyennes de a, $a^\dagger$ et de $a^\dagger a$ sont donc données par :

$$\begin{cases} \langle a\rangle & = \langle z|a|z\rangle = z\langle z|z\rangle = z \\ \langle a^\dagger\rangle & = \langle z|a^\dagger|z\rangle = z^*\langle z|z\rangle = z^* \\ \langle a^\dagger a\rangle & = \langle z|a^\dagger a|z\rangle = zz^*\langle z|z\rangle = |z|^2 \end{cases} \tag{19}$$

En utilisant les définitions des opérateurs $\hat{x}$, $\hat{p}$, on obtient :

$$\begin{cases} \langle\hat{x}\rangle & = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(z^* + z) = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\, \mathfrak{Re}(z) \\ \langle\hat{p}\rangle & = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(z^* - z) = \sqrt{2m\hbar\omega}\, \mathfrak{Im}(z) \\ \langle H\rangle & = \hbar\omega(|z|^2 + \frac{1}{2}) \end{cases} \tag{20}$$

5. Si le système est dans un état propre du hamiltonien de l'oscillateur harmonique $|\varphi_n\rangle$, on trouve aisément :

$$\langle\varphi_n|\hat{x}|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle\varphi_n|a^\dagger + a|\varphi_n\rangle = 0 \qquad \langle\varphi_n|\hat{p}|\varphi_n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle\varphi_n|a^\dagger - a|\varphi_n\rangle = 0 \tag{21}$$

En effet, les opérateur d'échelle a et $a^\dagger$ changent le nombre d'excitations n ($a|\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n-1}\rangle$ et $a^\dagger|\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n+1}\rangle$). Sachant que les états propres de l'oscillateur sont orthonormés, on trouve les résultats indiqués. La valeur du hamiltonien est elle donnée par :

$$\langle\varphi_n|\hat{H}|\varphi_n\rangle = \hbar\omega\langle\varphi_n|a^\dagger a + \frac{1}{2}|\varphi_n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{22}$$

6. Nous voulons maintenant calculer les valeurs moyennes des opérateurs $\hat{x}^2$, $\hat{p}^2$ dans un état cohérent. Il faut donc calculer la valeur moyenne de $(a \pm a^\dagger)^2$. Comme $[a, a^\dagger] = 1$, on a $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$. Ainsi on a :
$$\langle(a^\dagger \pm a)^2\rangle = \langle a^{\dagger 2}\rangle + \langle a^2\rangle \pm 2\langle a^\dagger a\rangle \pm 1 \tag{23}$$
Il nous reste donc à évaluer la moyenne de a^2 et de $a^{\dagger 2}$. On trouve aisément :
$$\langle a^2\rangle = \langle z|aa|z\rangle = z\langle z|a|z\rangle = z^2 \qquad \text{et} \qquad \langle a^{\dagger 2}\rangle = \langle z|a^\dagger a^\dagger|z\rangle = z^*\langle z|a^\dagger|z\rangle = z^{*2} \tag{24}$$
Au point précédent nous avons trouvé $\langle a^\dagger a\rangle = |z|^2$. On obtient donc finalement :
$$\langle(a^\dagger \pm a)^2\rangle = z^2 + z^{*2} \pm 2zz^* \pm 1 = (z \pm z^*)^2 \pm 1 \tag{25}$$
Les moyennes de $\hat{x}^2$ et de $\hat{p}^2$ prennent donc la forme :
$$\langle\hat{x}^2\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(4\mathfrak{Re}^2(z) + 1) \qquad \text{et} \qquad \langle\hat{p}^2\rangle = \frac{m\omega\hbar}{2}(4\mathfrak{Im}^2(z) + 1) \tag{26}$$

7. Nous voulons maintenant faire le même calcul si le système est dans un état propre du hamiltonien de l'oscillateur harmonique. On a $\hat{x}^2 \propto a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + aa^\dagger$. Or les termes a^2 et $a^{\dagger 2}$ changent le nombre d'excitations et ne contribuent donc pas à $\langle\varphi_n|\hat{x}^2|\varphi_n\rangle$. On trouve donc en utilisant $[a, a^\dagger] = 1$:
$$\langle\varphi_n|\hat{x}^2|\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle\varphi_n|1 + 2a^\dagger a|\varphi_n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(1 + 2n) \tag{27}$$
De la même manière on trouve pour $\langle\varphi_n|\hat{p}^2|\varphi_n\rangle$:
$$\langle\varphi_n|\hat{p}^2|\varphi_n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(1 + 2n) \tag{28}$$
Sur un état propre du hamiltonien de l'oscillateur harmonique, $\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \sqrt{\langle\varphi_n|\hat{x}^2|\varphi_n\rangle}\sqrt{\langle\varphi_n|\hat{p}^2|\varphi_n\rangle}$ puisque les moyennes de $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sont nulles. On trouve donc finalement :
$$\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}(1 + 2n) \geq \frac{\hbar}{2} \tag{29}$$

8. Nous avons maintenant tous les éléments pour calculer $\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p}$ sur un état cohérent, et ainsi comparer le résultat avec la relation d'incertitude de Heisenberg.
$$\Delta\hat{x} \equiv \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \qquad \text{et} \qquad \Delta\hat{p} \equiv \sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \tag{30}$$
En combinant ces deux résultats, on trouve finalement :
$$\boxed{\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \frac{\hbar}{2}} \tag{31}$$
D'après la relation d'incertitude de Heisenberg : $\Delta\hat{x}\Delta\hat{p} \geqslant \hbar/2$. La valeur obtenue pour un état cohérent est donc la plus petite possible.
Si nous voulons savoir si $\Delta\hat{x}$ est plus petit ou plus grand que $\Delta\hat{p}$, nous devons tout d'abord comprendre quelle grandeur comparer. Le hamiltonien s'écrit :
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \equiv \hat{P}^2 + \hat{X}^2 \tag{32}$$

où maintenant $\hat{P}$ et $\hat{X}$ ont les mêmes dimensions. Leur variance peuvent donc être comparées. Or l'on a :

$$\Delta\hat{X} = \sqrt{\frac{1}{2}m\omega^2}\,\Delta\hat{x} = \frac{1}{2}\sqrt{\hbar\omega} \qquad \text{et} \qquad \Delta\hat{P} = \sqrt{\frac{1}{2m}}\,\Delta\hat{p} = \frac{1}{2}\sqrt{\hbar\omega} \tag{33}$$

On voit donc que le secteur cinétique et le secteur potentiel contribuent de façon identique dans la relation de Heisenberg. Il existe d'autres états qui saturent aussi le principe d'incertitude de Heisenberg mais pour lesquels la contribution de ces deux secteurs n'est pas identique. Ils sont alors par exemple appelés "squeezed coherent states" (états cohérents comprimés).

De plus, nous avons vu au cours que pour l'état fondamental on a $\Delta\hat{x}\,\Delta\hat{p} = \hbar/2$; nous retrouvons ici ce résultat puisque l'état fondamental correspond à l'état cohérent $z = 0$, autrement dit : $|0\rangle = |\varphi_0\rangle$.

9. L'équation de Schrödinger pour $|z(t)\rangle$ s'écrit :

$$i\hbar\frac{d}{dt}|z(t)\rangle = \hat{H}|z(t)\rangle \qquad \rightarrow \qquad i\hbar\frac{d}{dt}\sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle = \sum_n E_n c_n(t)|\varphi_n\rangle \tag{34}$$

En projetant sur $|\varphi_m\rangle$, on obtient aisément :

$$\frac{1}{c_n(t)}\frac{d}{dt}c_n(t) = -\frac{i}{\hbar}E_n \qquad \rightarrow \qquad c_n(t) = c_n\,e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \tag{35}$$

10. Nous avons vu au point précédent que si l'on fait évoluer état cohérent pendant un temps t, on obtient

$$|z(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle \tag{36}$$

Afin de montrer que $|z(t)\rangle$ est un état cohérent, il suffit de montrer qu'il peut s'écrire sous la forme (à une phase près)

$$|z(t)\rangle = \sum_n \frac{w^n}{\sqrt{n!}}e^{-|w|^2/2}|\varphi_n\rangle \tag{37}$$

Comme le hamiltonien de l'oscillateur harmonique s'écrit $\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2)$, on a $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$ et on peut réécrire $|z(t)\rangle$ comme :

$$\begin{aligned} |z(t)\rangle &= \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}e^{-|z|^2/2}e^{-i\omega(n+1/2)t}|\varphi_n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2}\sum_n \frac{(ze^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}e^{-|z|^2/2}|\varphi_n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2}|z\,e^{-i\omega t}\rangle \end{aligned} \tag{38}$$

Il s'agit bien d'un état cohérent ayant pour valeur propre de $\hat{a}$ la valeur $z\,e^{-i\omega t}$.

11. On veut maintenant calculer la moyenne de $\hat{x}$ dans l'état $|z(t)\rangle$:

$$\langle\hat{x}(t)\rangle = \langle z(t)|\hat{x}|z(t)\rangle = \langle z\,e^{-i\omega t}|\hat{x}|z\,e^{-i\omega t}\rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\mathfrak{Re}(z\,e^{-i\omega t}) \propto \cos(\omega t + \eta) \tag{39}$$

Notez que ce résultat aurait pu être obtenu à partir du théorème de Ehrenfest ! En effet, ce dernier stipule que

$$\frac{d\langle\hat{O}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{O},\hat{H}]\rangle \tag{40}$$

où $\langle\hat{O}\rangle = \langle\psi(t)|\hat{O}|\psi(t)\rangle$. La démonstration du théorème se base uniquement sur l'équation de Schrödinger pour $|\psi(t)\rangle$:

$$\frac{d\langle\hat{O}\rangle}{dt} = \frac{d\langle\psi(t)|}{dt}\hat{O}|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{O}\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \frac{-1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}^\dagger\hat{O}|\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{O}\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{41}$$

qui est bien le résultat annoncé. On a utilisé l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \qquad \to \qquad -i\hbar\frac{d\langle\psi(t)|}{dt} = \langle\psi(t)|\hat{H}^\dagger \tag{42}$$

et que $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$. Si l'évolution temporelle de $\langle\psi(t)|$ vous paraît obscure, pensez à $|\psi(t)\rangle$ comme à un vecteur et à $\hat{H}$ comme à une matrice et prenez le conjugué hermitique de l'équation de Schrödinger.

Utilisons maintenant ce résultat pour calculer l'évolution de $\langle\hat{x}\rangle$. Appliquons tout d'abord le théorème de Ehrenfest à l'opérateur $\hat{x}$:

$$\frac{d\langle\hat{x}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{x},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\langle[\hat{x},\hat{p}^2]\rangle = \frac{\langle\hat{p}\rangle}{m} \tag{43}$$

où l'on a utilisé que $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$ et $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$. De la même manière, on a :

$$\frac{d\langle\hat{p}\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{p},\hat{H}]\rangle = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2}m\omega^2\langle[\hat{p},\hat{x}^2]\rangle = -m\omega^2\langle\hat{x}\rangle \tag{44}$$

En utilisant les deux dernières équations, on retrouve bien notre résultat :

$$\frac{d^2\langle\hat{x}\rangle}{dt^2} = -\omega^2\langle\hat{x}\rangle \qquad \to \qquad \langle\hat{x}\rangle \propto \cos(\omega t + \eta) \tag{45}$$