Université Paris-Saclay – Master 2 AMS – 2020-2021
Analyse semiclassique

(Stéphane Nonnenmacher)

Feuille de TD: Principe d'incertitude et états cohérents

1. Principe d'incertitude de Heisenberg

On considère d'abord le cas de la dimension 1. Soit $u \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$ une fonction d'onde décrivant l'état d'une particule quantique. On la suppose normalisée: $\|u\|_{L^2} = 1$. On rappelle que cette fonction d'onde permet de définir la densité de probabilité de position $|u(x)|^2$ (resp. d'impulsion $|\mathcal{F}_\hbar u(\xi)|^2$), qui confèrent à x (resp. ξ) le statut de variables aléatoires.

On note $\mathbb{E}_u x$ et $\mathrm{Var}_u(x)$, (resp. $\mathbb{E}_u \xi$ et $\mathrm{Var}_u(\xi)$) la valeur moyenne et la variance de la variable aléatoire x (resp. de la variable aléatoire ξ) pour les lois de probabilités correspondant à la particule dans l'état u:

$$\mathbb{E}_u x = \langle u, \mathrm{Op}_\hbar(x) u\rangle = \int_{\mathbb{R}} x\, |u(x)|^2 dx, \quad \mathbb{E}_u \xi = \langle u, \mathrm{Op}_\hbar(\xi) u\rangle = \int_{\mathbb{R}} \xi^2\, |\mathcal{F}_\hbar u(\xi)|^2 d\xi,$$

et de même pour les moyennes de x^2 et ξ^2 (moments d'ordre 2).

1) Démontrer l'inégalité, pour toute fonction d'onde $u \in \mathscr{S}(\mathbb{R})$:

$$\mathbb{E}_u(x^2)\, \mathbb{E}_u(\xi^2) \geq \Big(\frac{\hbar}{2}\Big)^2. \tag{1.1}$$

Astuce: considérer l'état $\phi_\lambda = (\mathrm{Op}_\hbar(x) + i\lambda\, \mathrm{Op}_\hbar(\xi))u$, et utiliser le fait que $\|\phi_\lambda\|_{L^2} \geq 0$ pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$.

On rappelle que la variance d'une variable aléatoire $\bullet$ est définie par $\mathrm{Var}_u(\bullet) = \mathbb{E}_u\big((\bullet - \mathbb{E}_u \bullet)^2\big)$, et l'écart-type $\Delta\bullet = \sqrt{\mathrm{Var}(\bullet)}$. Montrer qu'en agissant avec les opérateurs de translations de Weyl-Heisenberg sur la fonction u, on peut se ramener au cas où $\mathbb{E}_u x = \mathbb{E}_u \xi = 0$; en déduire ainsi une inégalité portant sur les variances[1]:

$$\mathrm{Var}_u(x)\ \mathrm{Var}_u(\xi) \geq \Big(\frac{\hbar}{2}\Big)^2. \tag{1.2}$$

Remarque: en mécanique quantique, $\Delta_u x$ représente l'incertitude initiale lors de la mesure de la position de la particule dans l'état u. De même, $\Delta_u \xi$ représente l'incertitude initiale lors de la mesure de l'impulsion. L'inégalité ci-dessus indique qu'on ne peut prédire à

[1] En physique l'inégalité de Heisenberg s'exprime souvent en termes des écart-types $\Delta_u \bullet = \sqrt{\mathrm{Var}_u(\bullet)}$. On a alors $\Delta_u x\, \Delta_u \xi \geq \hbar/2$.

l'avance à la fois la position et l'impulsion de la particule avec des précisions arbitraires. Mathématiquement, cela provient du fait qu'une fonction $u(x)$ et sa transformée de Fourier $\mathcal{F}_\hbar u(\xi)$ ne peuvent être simultanément arbitrairement localisées: une fonction u très localisée implique que sa transformée de Fourier est peu localisée.

2) Supposons que l'état u est "centré" dans l'espace des phases: $\mathbb{E}_u x = \mathbb{E}_u \xi = 0$. Montrer que l'égalité est atteinte dans (1.1) si et seulement si u est un état gaussien, qui s'écrit pour un certain paramètre $\alpha > 0$:

$$\psi^{\alpha,\hbar}(x) = \big(\frac{\alpha}{\pi\hbar}\big)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2\hbar}}.$$

Dans le cas $\alpha = 1$, on appelle $\psi^{1,\hbar} := \psi^\hbar$ l'*état cohérent standard* centré au point $(x = 0, \xi = 0)$. Expliquer pourquoi on peut affirmer que $\psi^\hbar$ se concentre fortement au point $(0,0)$ de l'espace des phases, dans la limite semiclassique $\hbar \ll 1$.

3) Identifier les états minimisant l'inégalité de Heisenberg, pour des valeurs moyennes $\mathbb{E}x = x_0$, $\mathbb{E}\xi = \xi_0$ arbitraires. On notera $\psi^\hbar_{(x_0,\xi_0)}$ les *états cohérents* correspondants. L'état cohérent $\psi^\hbar_{(x_0,\xi_0)}$ représente la meilleure approximation d'une particule ponctuelle classique de vitesse x_0 et d'impulsion ξ_0, qu'on puisse obtenir en mécanique quantique.
Vérifier que pour des points d'espace des phases distincts $(x_0,\xi_0) \neq (x_1,\xi_1)$, les états cohérents $\psi^\hbar_{(x_0,\xi_0)}$ et $\psi^\hbar_{(x_1,\xi_1)}$ sont quasi-orthogonaux dans le limite semiclassique.

4) Retrouver $\psi^\hbar_{(x_0,\xi_0)}$ à partir de $\psi^\hbar_{(0,0)}$, en utilisant les opérateurs de translation dans l'espace des phases.

5)* Généraliser ces résultats aux dimensions $n \geq 1$.

2. Évolution des états cohérents pour le mouvement libre sur $\mathbb{R}$

On considère l'équation de Schrödinger qui régit le mouvement d'une particule libre sur $\mathbb{R}$ (de masse $m = 1$). Sa fonction d'onde $u(t, x)$ vérifie :

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad u(t = 0) \in H^2(\mathbb{R}), \quad \|u(0)\|_{L^2} = 1\,. \tag{2.1}$$

1) Montrer que si u est une solution de cette équation, alors sa norme L^2 (probabilité totale) est conservée par la dynamique: $\|u(t)\|_{L^2} = \|u(0)\|_{L^2}$. On va montrer que cette équation admet une solution pour toute fonction initiale $u \in H^2(\mathbb{R})$, et on va étudier cette solution pour la donnée initiale $u(0) = \psi^{\hbar}_{(x_0,\xi_0)}$.

2) Comme le laplacien est une opérateur différentiel à coefficients constants, il est naturel de résoudre (2.1) en passant en transformée de Fourier. Ecrire l'équation satisfaite par $\mathcal{F}_\hbar u(t)$. Résoudre cette équation en calculant explicitement les fonctions $\mathcal{F}_\hbar u(t)$, puis $u(t)$. Traiter le cas où $u(0) = \psi^{\alpha,\hbar}_{(0,0)}$ (d'abord avec $\alpha = 1$ puis $\alpha > 0$ quelconque). Vérifier que la fonction $u(t)$ est gaussienne pour tout $t \in \mathbb{R}$ (avec un paramètre qu'on explicitera), elle est appelée un *état cohérent déformé.*

3) On prend maintenant comme donnée initiale $u(0) = \psi^{\hbar}_{(x_0,\xi_0)}$. Calculer explicitement $u(t)$. Calculer les valeurs moyennes et les écart-types de x et ξ pour la fonction $u(t)$. En déduire que la particule quantique décrite par $u(t)$ suit approximativement le mouvement de la particule libre classique de donnéees initiales (x_0, ξ_0) (à condition que le temps ne soit pas trop grand). Comparer $u(t)$ et $\psi^{\hbar}_{(x_0+t\xi_0,\xi_0)}$.

Remarque: On dit que l'équation de Schrödinger est *dispersive*, en ce sens qu'elle augmente l'incertitude en position de l'état quantique (elle “disperse” la fonction d'onde, par opposition à l'équation des ondes $(\partial_t^2 - \Delta)\psi = 0$).