

# Les postulats de la mécanique quantique

Les résultats auxquels nous avons abouti au cours du chapitre 1, en utilisant le formalisme des fonctions d'onde, vont être énoncés sous forme de postulats en utilisant la notion de vecteur d'état.

## 3.4.1 Postulats fondamentaux

### a) État d'un système

L'état quantique d'une particule peut être caractérisé par un vecteur d'état  $|\psi\rangle$  de l'espace vectoriel  $\mathcal{E}$ . On postule qu'il en est de même pour tout système quantique.

**Postulat I.** À tout instant  $t$ , l'état d'un système quantique est décrit par un vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  appartenant à l'espace vectoriel  $\mathcal{E}$  des états quantiques.

### b) Opérateur correspondant à une grandeur physique

Outre l'énergie des particules qui figure dans l'équation de Schrödinger, des grandeurs physiques comme l'impulsion, le moment cinétique, etc., peuvent être définies en mécanique quantique. Nous avons vu, par exemple, qu'à l'impulsion classique  $\mathbf{p}$ , on fait correspondre l'opérateur  $-i\hbar \nabla$ ; à l'énergie, l'opérateur hamiltonien. Cette règle de correspondance se généralise.

**Postulat II.** À toute grandeur physique mesurable  $\mathcal{A}$ , on peut faire correspondre un opérateur  $A$  qui agit sur les vecteurs d'état de l'espace  $\mathcal{E}$ ; cet opérateur est une observable.

### c) Mesure des grandeurs physiques

L'équation de Schrödinger  $H\psi = E\psi$  est une équation dont les énergies  $E$  sont les valeurs propres de l'opérateur  $H$ . De même, toutes les grandeurs physiques mesurables vont être des valeurs propres de l'opérateur correspondant. La mesure d'une grandeur physique étant nécessairement un nombre réel, l'opérateur correspondant doit être hermitien.

**Postulat III.** Les valeurs propres de l'observable  $A$ , correspondant à une grandeur physique  $\mathcal{A}$ , sont les seules valeurs mesurables.

### d) Équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger (1.1.15) :

$$H\psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \partial\psi(\mathbf{r}, t)/\partial t \quad (3.4.1)$$

est écrite en réalisation- $\mathbf{r}$ . Pour les vecteurs d'état, l'opérateur hamiltonien  $H$  sera construit en utilisant les opérateurs  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{P}$  agissant dans l'espace  $\mathcal{E}$ . Pour un système quantique quelconque, l'opérateur hamiltonien  $H$  sera obtenu à partir de l'expression de la fonction classique de Hamilton.

**Postulat IV.** L'opérateur hamiltonien  $H$  d'un système est l'observable associée à l'énergie totale de ce système. L'évolution dans le temps du vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  est régie par l'équation de Schrödinger :

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (3.4.2)$$

### 3.4.2 Construction de l'opérateur hamiltonien

L'opérateur hamiltonien  $H$  d'un système sera construit à partir de la fonction de Hamilton dans laquelle figurent diverses grandeurs physiques de la mécanique classique relatives au système.

#### a) Observables décrivant des grandeurs physiques

Les grandeurs de la mécanique classique sont exprimées en fonction des vecteurs position  $\mathbf{r}$  et impulsion  $\mathbf{p}$ . Ces vecteurs seront remplacés par les observables  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{P}$ .

Par exemple, l'opérateur associé à l'énergie cinétique  $\mathbf{p}^2/2m$  est obtenu en remplaçant  $\mathbf{p}^2$  par l'observable  $\mathbf{P}^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$ . L'opérateur associé à l'énergie potentielle  $V(\mathbf{r})$  est simplement  $V(\mathbf{R})$ .

Il n'est cependant pas toujours possible de remplacer directement dans l'expression classique, les vecteurs  $\mathbf{r}$  et  $\mathbf{p}$  par les opérateurs correspondants. Par exemple, considérons une grandeur physique classique telle que le produit scalaire  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$  :

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = xp_x + yp_y + zp_z = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = p_x x + p_y y + p_z z \quad (3.4.3)$$

Si le produit scalaire classique est commutatif, il n'en est pas de même des produits d'opérateurs  $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$  et  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{R}$  ; de plus, ces produits ne sont pas des opérateurs hermitiens. Pour avoir un opérateur hermitien, il faut former la combinaison suivante :

$$\frac{1}{2}(\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{R}) \quad (3.4.4)$$

On dira que l'opérateur a été *symétrisé*. De manière générale, l'observable qui décrit une grandeur physique doit être convenablement symétrisée lorsque cette grandeur fait intervenir des produits d'opérateurs qui ne commutent pas entre eux.

#### b) Opérateur hamiltonien

Dans le cas d'une particule de masse  $m$  dans un potentiel scalaire, l'hamiltonien classique s'écrit :

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (3.4.5)$$

L'hamiltonien correspondant agissant dans l'espace des vecteurs d'état s'écrit :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \quad (3.4.6)$$

Pour un ensemble de particules, l'hamiltonien classique est la somme des hamiltoniens relatifs à chacune des particules. Il en sera alors de même pour l'hamiltonien  $H$  du système.

### 3.4.3 Probabilité d'obtention d'une valeur propre lors d'une mesure

#### a) Mesure de l'énergie

Considérons un système qui se trouve dans un état quelconque décrit par le vecteur  $|\psi\rangle$  normé. Notons  $|u_n\rangle$  les vecteurs propres orthonormés de l'hamiltonien du système, correspondant aux états stationnaires de celui-ci, associés aux valeurs propres  $E_n$ , non dégénérées. Le vecteur  $|\psi\rangle$  peut s'écrire sur la base  $\{|u_n\rangle\}$  :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \quad (3.4.7)$$

Dans un état stationnaire, l'énergie  $E_n$  du système est donnée par l'élément matriciel suivant de l'hamiltonien  $H$  :

$$E_n = \langle u_n | H | u_n \rangle \quad (3.4.8)$$

Cherchons à présent le sens physique qu'il faut attribuer à un élément du même type pour un système dans un état non stationnaire, c'est-à-dire :

$$W = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (3.4.9)$$

Substituant le développement (3.4.7) de  $\psi$  dans l'expression (3.4.9) et tenant compte de l'équation  $H|u_n\rangle = E_n|u_n\rangle$ , on obtient :

$$W = \langle \sum_n c_n u_n | H | \sum_j c_j u_j \rangle = \sum_{n,j} c_n^* c_j E_j \langle u_n | u_j \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \quad (3.4.10)$$

Selon le postulat III, les seules valeurs mesurables sont les valeurs  $E_n$ . Or si l'on effectue un grand nombre  $N$  de mesures de l'énergie sur un système dans un état quelconque  $|\psi\rangle$ , on obtiendra un certain nombre de fois,  $n_j$ , la valeur  $E_j$ . Lorsque  $N$  devient très grand, le rapport  $n_j/N$  devient peu différent de la probabilité théorique  $P(E_j)$  d'obtenir la valeur  $E_j$  lors d'une mesure, soit :

$$P(E_j) \simeq \frac{n_j}{N} \quad (3.4.11)$$

Or, la valeur moyenne,  $\langle W_{\text{exp}} \rangle$ , des valeurs obtenues à partir de ces  $N$  mesures est la somme des valeurs expérimentales divisée par  $N$ , soit en tenant compte de (3.4.11) :

$$\langle W_{\text{exp}} \rangle = \frac{1}{N} \sum_j n_j E_n \simeq \sum_j P(E_j) E_j \quad (3.4.12)$$

Comparant les expressions (3.4.10) et (3.4.12), on voit que  $W$  peut être interprété comme une valeur moyenne de l'énergie en considérant  $|c_n|^2$  comme la probabilité d'obtenir pour résultat  $E_n$  lors d'une mesure. Cette interprétation est confortée par le fait que la somme des probabilités est bien égale à l'unité, puisqu'on a précisément, en utilisant la relation (3.4.7) :

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 = 1 \quad (3.4.13)$$

$|\psi\rangle$  étant de norme unité.

**b) Valeurs propres non dégénérées**

L'interprétation précédente des quantités  $|c_n|^2$  peut être étendue à toutes les observables. Considérons une observable  $A$  dont le spectre ne comporte que des valeurs propres  $a_n$  non dégénérées et soit  $|u_n\rangle$  le vecteur propre normé associé à  $a_n$ . L'ensemble des vecteurs d'état  $|u_n\rangle$  forme une base de l'espace  $\mathcal{E}$  et un vecteur  $|\psi\rangle$  quelconque peut être développé sous la forme :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \tag{3.4.14}$$

Comme on l'a fait pour l'énergie, on postule que  $|c_n|^2$  représente la probabilité, notée  $P(a_n)$ , d'obtenir la valeur propre  $a_n$  comme résultat d'une mesure de la grandeur physique  $\mathcal{A}$  à laquelle correspond l'observable  $A$ .

**Postulat V.** Soit  $\mathcal{A}$  une grandeur physique d'un système quantique et  $A$  l'observable correspondante dont le spectre ne comporte que des valeurs propres non dégénérées  $a_n$  associées aux vecteurs propres orthonormés  $|u_n\rangle$ . Lorsqu'on mesure  $\mathcal{A}$  sur le système dans l'état quelconque  $|\psi\rangle$  de norme unité, la probabilité  $P(a_n)$  d'obtenir comme résultat de mesure  $a_n$  est donnée par :

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 \tag{3.4.15}$$

**c) Valeurs propres dégénérées**

Dans le cas d'un spectre comportant des valeurs propres  $a_n$  dégénérées  $g_n$  fois, il correspond à chaque valeur propre  $g_n$  vecteurs propres orthonormés  $|u_n^k\rangle$ , avec  $k = 1, 2, \dots, g_n$ . Le vecteur d'état  $|\psi\rangle$  peut être développé sur la base orthonormée  $\{|u_n^k\rangle\}$  sous la forme :

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} c_n^k |u_n^k\rangle \tag{3.4.16}$$

Puisqu'on a  $g_n$  états  $|u_n^k\rangle$  correspondant à la même valeur propre  $a_n$ , la probabilité d'obtenir  $a_n$  comme résultat d'une mesure doit être égale à la somme des probabilités relatives à chaque état  $|u_n^k\rangle$ , soit :

$$P(a_n) = \sum_{k=1}^{g_n} |c_n^k|^2 \tag{3.4.17}$$

**Postulat VI.** Soit  $\mathcal{A}$  une grandeur physique d'un système et  $A$  l'observable correspondante ; soit  $a_n$  une valeur propre de  $A$  dégénérée  $g_n$  fois et associée aux vecteurs propres orthonormés  $|u_n^k\rangle$ . Lorsqu'on mesure  $\mathcal{A}$  sur le système dans l'état  $|\psi\rangle$  de norme unité, la probabilité  $P(a_n)$  d'obtenir comme résultat de mesure  $a_n$  est donnée par :

$$P(a_n) = \sum_{k=1}^{g_n} |\langle u_n^k | \psi \rangle|^2 \tag{3.4.18}$$

### 3.4.4 Valeurs moyennes d'une observable

Les postulats V et VI ont été obtenus en généralisant le raisonnement effectué sur la valeur moyenne de l'énergie donnée par (3.4.9). Réciproquement, partant des postulats V et VI, on doit retrouver, pour une observable quelconque  $A$ , une expression analogue à (3.4.9) pour la valeur moyenne de  $A$ .

Considérons un système quantique dans un état quelconque  $|\psi\rangle$ . La valeur moyenne, notée  $\langle A \rangle_\psi$ , d'une observable  $A$  est donnée par :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n P(a_n) a_n \tag{3.4.19}$$

En reportant dans cette dernière relation l'expression de  $P(a_n)$  donnée par (3.4.18), on obtient :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} |\langle u_n^k | \psi \rangle|^2 a_n = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} \langle \psi | a_n u_n^k \rangle \langle u_n^k | \psi \rangle \tag{3.4.20}$$

Puisqu'on a :  $A |u_n^k\rangle = a_n |u_n^k\rangle$ , la relation précédente devient :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} \langle \psi | A u_n^k \rangle \langle u_n^k | \psi \rangle = \langle \psi | A \left( \sum_n \sum_{k=1}^{g_n} |u_n^k\rangle \langle u_n^k| \right) | \psi \rangle \tag{3.4.21}$$

La base  $\{|u_n^k\rangle\}$  étant orthonormée, le terme entre parenthèses dans la relation qui précède est égal à l'opérateur unité donné par (3.2.26). On obtient alors :

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle \tag{3.4.22}$$

Lorsqu'un système se trouve dans un état quelconque  $|\psi\rangle$  de norme unité, la valeur moyenne de l'observable  $A$  est donnée par (3.4.22). Cette expression étant une conséquence du postulat V, on peut évidemment poser comme postulat l'expression de la valeur moyenne (3.4.22) et en déduire l'expression des probabilités données par (3.4.18).

## 3.5 PROPRIÉTÉS DES OBSERVABLES

### 3.5.1 Évolution de la valeur moyenne d'une observable

Considérons un système dans un état  $|\psi(t)\rangle$ , dont la norme est unité à l'instant  $t = 0$ , c'est-à-dire :

$$\langle \psi(0) | \psi(0) \rangle = 1 \tag{3.5.1}$$

et soit  $A(t)$  une observable associée à une grandeur physique  $\mathcal{A}(t)$ , soit :

$$\mathcal{A}(t) \rightarrow A(t) \tag{3.5.2}$$

Supposons que la valeur moyenne  $\langle A \rangle$  dépende du temps, ce qu'on note  $\langle A \rangle(t)$  ; on a :

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle \tag{3.5.3}$$

Cette valeur moyenne dépend du temps parce que le vecteur  $|\psi(t)\rangle$  en dépend mais aussi éventuellement l'opérateur  $A(t)$ . Dérivons l'expression (3.5.3) par rapport à  $t$  ; il vient :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi | \right) | A | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | A | \left( \frac{d}{dt} | \psi \rangle \right) \tag{3.5.4}$$

Transformons cette dernière équation, d'une part en utilisant la dérivée de  $|\psi\rangle$  donnée par l'équation de Schrödinger :

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} H |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} |H\psi\rangle \quad (3.5.5)$$

d'autre part en calculant la dérivée de  $\langle\psi|$ . Pour cela, remarquons que l'opérateur  $H$  est hermitien ; il vient, en utilisant (3.5.5) et (3.2.12) :

$$\frac{d}{dt} \langle\psi| = \frac{i}{\hbar} \langle\psi H| = \frac{i}{\hbar} \langle\psi| H^\dagger = \frac{i}{\hbar} \langle\psi| H \quad (3.5.6)$$

Compte tenu de (3.5.6), l'expression (3.5.4) donne pour  $A = \mathbb{I}$  :

$$\frac{d}{dt} \langle\psi(t) | \psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar} \langle\psi(t) | H | \psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar} \langle\psi(t) | H | \psi(t)\rangle = 0 \quad (3.5.7)$$

On en déduit que la norme de l'état du système reste indépendante du temps. Cela signifie que, lorsqu'à l'instant zéro le vecteur d'état  $|\psi\rangle$  du système est normalisé à l'unité, son état  $|\psi(t)\rangle$  conserve à tout instant sa norme, justifiant ainsi la conservation de la probabilité de présence.

L'équation (3.5.4) s'écrit alors, compte tenu de (3.5.5) et (3.5.6) :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle\psi | AH - HA | \psi\rangle + \langle\psi | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi\rangle \quad (3.5.8)$$

Les termes de droite de cette dernière équation font apparaître les valeurs moyennes des opérateurs  $[A, H]$  et  $\partial A/\partial t$ , d'où :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle [A(t), H] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle \quad (3.5.9)$$

### 3.5.2 Constante du mouvement

Si  $A$  ne dépend pas explicitement du temps, alors  $\langle \partial A/\partial t \rangle$  est nul. La dérivée de la valeur moyenne donnée par (3.5.9) montre que la dérivée totale de  $\langle A \rangle$  se réduit alors à :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle [A, H] \rangle \quad (3.5.10)$$

Les grandeurs physiques pour lesquelles on a simultanément :

$$\langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle = 0 \quad ; \quad \langle [A, H] \rangle = 0 \quad (3.5.11)$$

donnent pour expression de (3.5.9) :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = 0 \quad (3.5.12)$$

Dans ce cas, quel que soit l'état  $|\psi\rangle$  du système, la valeur moyenne de  $A$  dans cet état n'évolue pas au cours du temps. Lorsqu'il en est ainsi, on dit que l'observable  $A$  est une *constante du mouvement*.

En particulier, si le système est conservatif  $H$  ne dépend pas de  $t$ , et l'hamiltonien  $H$  est lui-même une constante du mouvement.

### 3.5.3 Théorème d'Ehrenfest

Appliquons la formule (3.5.9) aux observables  $\mathbf{R}$  et  $\mathbf{P}$  pour un système formé d'une particule de masse  $m$ , plongée dans un potentiel scalaire  $V(\mathbf{R})$ . On a :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \quad (3.5.13)$$

L'observable  $\mathbf{R}$  ne dépendant pas du temps et puisque  $[\mathbf{R}, \mathbf{P}^2] = 2i\hbar \mathbf{P}$ ,

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{R} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{R}, H] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{R}, \frac{\mathbf{P}^2}{2m}] \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{P} \rangle \quad (3.5.14)$$

De même, l'observable  $\mathbf{P} = -i\hbar \nabla$  ne dépend pas du temps et l'on a :

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{P}, H] \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.5.15)$$

Les équations (3.5.14) et (3.5.15) constituent le *théorème d'Ehrenfest*.

#### ► Passage de la mécanique quantique à la mécanique classique

Les équations d'Ehrenfest ont une forme qui rappelle les équations classiques de Hamilton-Jacobi pour une particule :

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r} = \frac{1}{m} \mathbf{p} \quad ; \quad \frac{d}{dt} \mathbf{p} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (3.5.16)$$

qui, dans ce cas simple, permettent d'obtenir l'équation de Newton :

$$m \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{r} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (3.5.17)$$

Le théorème d'Ehrenfest va permettre de faire le rapprochement entre les mécaniques quantique et classique. Pour cela, considérons un paquet d'ondes représentant l'onde associée au corpuscule. Appelons centre du paquet d'ondes, à l'instant  $t$ , le point de coordonnées  $\langle \mathbf{R} \rangle(t)$ . L'ensemble de ces points, au cours du temps, constitue la trajectoire suivie par le centre du paquet d'ondes, analogue à la trajectoire de la particule. Le mouvement de ce centre vérifie-t-il les équations de la mécanique classique ? Compte tenu des relations (3.5.14) et (3.5.15), on a :

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \mathbf{R} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.5.18)$$

Or la force classique est égale à  $\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r})$  et, en général :

$$\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \neq \nabla V(\mathbf{r}) \quad (3.5.19)$$

En conséquence, on n'a pas, en toute rigueur  $m(d^2/dt^2)\langle \mathbf{R} \rangle$  égal à  $\mathbf{F}$ . Cependant,  $\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$  devient pratiquement identique à  $\nabla V(\mathbf{r})$  pour des paquets d'ondes très localisés. En effet :

$$\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi | \nabla V(\mathbf{r}) | \psi \rangle \quad (3.5.20)$$

En conséquence, on n'a pas, en toute rigueur  $m(d^2/dt^2)\langle \mathbf{R} \rangle$  égal à  $\mathbf{F}$ . Cependant,  $\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle$  devient pratiquement identique à  $\nabla V(\mathbf{r})$  pour des paquets d'ondes très localisés. En effet :

$$\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi | \nabla V(\mathbf{r}) | \psi \rangle \quad (3.5.20)$$

Or, si le paquet d'ondes est très localisé au voisinage de  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$ , la fonction d'onde  $\psi(\mathbf{r}, t)$  ne prend de valeurs notables que dans un domaine très petit où  $\nabla V(\mathbf{r})$  varie très peu. On peut donc le considérer comme constant dans ce domaine, d'où :

$$\langle \nabla V(\mathbf{r}) \rangle \simeq [\nabla V(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0} \langle \psi | \psi \rangle = [\nabla V(\mathbf{r})]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0} \quad (3.5.21)$$

La valeur moyenne est alors égale au gradient de  $V(\mathbf{r})$ , donc à la force  $\mathbf{F}$  classique. On peut donc dire que la mécanique quantique rejoint la mécanique classique lorsque l'on considère certaines conditions limites.

### 3.5.4 Courant de probabilité

L'équation de Schrödinger d'une particule de masse  $m$  dans un potentiel  $V(\mathbf{r})$ , s'écrit en réalisation- $\mathbf{r}$  :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.5.22)$$

Prenant le complexe conjugué des termes de cette équation, il vient :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi^*(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}, t) \quad (3.5.23)$$

Multipliant les termes de (3.5.22) par  $\psi^*$  et ceux de (3.5.23) par  $\psi$ , puis retranchant les deux équations ainsi obtenues, il vient :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* \psi = \frac{\hbar^2}{2m} (\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) \quad (3.5.24)$$

Utilisant l'identité  $(\psi \Delta \psi^* - \psi^* \Delta \psi) = \text{div}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$ , l'équation (3.5.24) devient :

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 + \frac{i\hbar}{2m} \text{div}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = 0 \quad (3.5.25)$$

Si  $\psi(\mathbf{r}, t)$  est de norme unité, la quantité  $|\psi|^2$  est la densité de probabilité de présence. Posons :

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi|^2 \quad ; \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \text{Re} \left( \psi^* \frac{\mathbf{P}}{m} \psi \right) \quad (3.5.26)$$

L'équation (3.5.25) s'écrit avec ces notations :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (3.5.27)$$

Sous cette forme, l'équation (3.5.27) est identique à l'équation classique de continuité dans un fluide de masse volumique  $\rho(\mathbf{r}, t)$  et de vecteur densité de courant  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ . On peut alors interpréter la fonction  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  comme la densité volumique d'un « fluide de probabilité » dont la conservation locale est donnée par l'équation (3.5.27). Le vecteur  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  est appelé la densité du *courant de probabilité*.

### 3.5.5 Écart quadratique moyen

Lorsqu'on a une dispersion statistique de données expérimentales  $x_j$ , on mesure cette dispersion par l'écart quadratique moyen  $\sigma$ , défini par :

$$\sigma = \sqrt{\langle (x_j - \langle x \rangle)^2 \rangle} \quad (3.5.28)$$

où  $\langle x \rangle$  est la valeur moyenne des grandeurs  $x_j$ .

Considérons un système quantique dans l'état  $|\psi\rangle$ , dont on mesure les valeurs propres d'un opérateur  $A$ . L'opérateur qui va décrire l'écart par rapport à la moyenne, écart qu'on note  $\delta A$ , est l'opérateur défini par :

$$\delta A = A - \langle A \rangle = A - \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (3.5.29)$$

Le carré de l'opérateur  $\delta A$  est donné par :  $(\delta A)^2 = (A - \langle A \rangle)^2$ . La valeur moyenne de  $(\delta A)^2$  s'obtient par :

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle \quad (3.5.30)$$

L'écart quadratique moyen, que nous noterons  $\Delta A$ , est alors défini par :

$$\Delta A = \sqrt{\langle (\delta A)^2 \rangle} = \sqrt{\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle} \quad (3.5.31)$$

Une application importante de cette dernière formule est celle où l'on considère les observables  $X$  et  $P_x$ . On démontre, à titre d'exercice, que le produit des écarts quadratiques moyens  $\Delta X \Delta P_x$  est tel que :

$$\Delta X \Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.5.32)$$

On obtient naturellement des expressions analogues pour  $Y, P_y$  et  $Z, P_z$ . Ce sont les trois inégalités de Heisenberg.