T.D. de Mécanique Quantique - SMP4
Correction Série N°4

Solution 1: *Système conservatif-Mesure d'une observable*

On considère un système physique dont l'espace des états à trois dimensions est rapporté à la base orthonormée $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. Soient **H** l'opérateur Hamiltonien du système, et **A** un opérateur hermitique agissant sur l'espace des états. Les deux représentations matricielles de ces deux opérateurs sont données par :

$$\widehat{H} = \hbar\omega \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \widehat{A} = \begin{pmatrix} 0 & b & 0 \\ a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2a \end{pmatrix}$$

avec ω et a sont des réels positifs. À $t = 0$, le système est décrit par le ket:

$$|\Psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|u_1\rangle - \frac{i}{\sqrt{3}}|u_2\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}|u_3\rangle$$

1) **Les valeurs propres, notées λ_k de A.**
Tout d'abord, comme **A** est hermitique, cela vaut dire que $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ et donc $A_{ij} = A^*_{ji} \implies a = b$.
Après, les valeurs propres sont déterminées en calculant le déterminant de $\widehat{A}$ comme suite :

$$\begin{aligned}
det(\widehat{A} - \lambda \mathbb{I}_{3\times 3}) &= \begin{vmatrix} 0-\lambda & a & 0 \\ a & 0-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 2a-\lambda \end{vmatrix} = 0 \\
&\iff (0-\lambda)\begin{vmatrix} 0-\lambda & 0 \\ 0 & 2a-\lambda \end{vmatrix} - a\begin{vmatrix} a & 0 \\ 0 & 2a-\lambda \end{vmatrix} + 0\begin{vmatrix} a & 0-\lambda \\ 0 & 0 \end{vmatrix} = 0 \\
&\iff \lambda^2\,(2a-\lambda) - a\,a(2a-\lambda) + 0 = 0 \\
&\iff (\lambda^2 - a^2)\,(2a-\lambda) = 0
\end{aligned}$$

Les valeurs propres de $\widehat{A}$ sont alors $\lambda_1 = +a$ (simple), $\lambda_2 = -a$ (simple) et $\lambda_3 = +2a$ (simple aussi).
Les vecteurs propres de $\widehat{A}$
Soient

- $|\phi_1\rangle = \sum_i x_i\,|u_i\rangle$ le vecteur propre associé à $\longrightarrow \lambda_1 = +a$.
- $|\phi_2\rangle = \sum_i y_i\,|u_i\rangle$ le vecteur propre associé à $\longrightarrow \lambda_1 = -a$.
- $|\phi_3\rangle = \sum_i z_i\,|u_i\rangle$ le vecteur propre associé à $\longrightarrow \lambda = 2a$.

Alors
$\circ$ $\widehat{A}\,|\phi_1\rangle = +a\,|\phi_1\rangle \implies x_1 + x_2 + x_3 = 0$, avec $\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \sum_i |x_i|^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$. On obtient alors le système :

$$\begin{cases} x_2 = x_1 \\ x_3 = 0 \\ x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1 = 2x_1^2 \end{cases} \implies \begin{cases} x_1 = 1/\sqrt{2} & \text{à un facteur près} \\ x_2 = 1/\sqrt{2} & \text{à un facteur près} \end{cases}$$

en général, on écrit $x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$, mais souvent on prend la phase $\theta = 0$. Il s'en suit que

$$\boxed{|\phi_1\rangle = \left(\,|u_1\rangle + |u_2\rangle\,\right)/\sqrt{2}}$$

○ $\widehat{A}\,|\phi_2\rangle = -a\,|\phi_2\rangle \implies y_1 + y_2 + y_3 = 0$, avec $\langle\phi_2|\phi_2\rangle = \sum_i |y_i|^2 = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = 1$. Aussi $\langle\phi_1|\phi_2\rangle = 0$ puisque sont deux vecteurs orthogonaux. On obtient alors le système :

$$\begin{cases} y_2 = -y_1 \\ y_3 = 0 \\ y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = 1 = 2y_1^2 \end{cases} \implies \begin{cases} y_1 = +1/\sqrt{2} & \text{à un facteur près} \\ y_2 = -1/\sqrt{2} & \text{à un facteur près} \end{cases}$$

en prenant la phase égale à zéro. Il s'en suit que

$$\boxed{|\phi_2\rangle = (\,|u_1\rangle - |u_2\rangle\,)/\sqrt{2}}$$

○ $\widehat{A}\,|\phi_3\rangle = 2a\,|\phi_3\rangle \implies z_1 + z_2 + z_3 = 0$, avec $\langle\phi_3|\phi_3\rangle = \sum_i |z_i|^2 = z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = 1$. Aussi $\langle\phi_1|\phi_3\rangle = \langle\phi_2|\phi_3\rangle = 0$ puisque sont des vecteurs orthogonaux deux à deux. On obtient alors le système :

$$\begin{cases} z_2 = 2z_1 \\ z_1 = 2z_2 \\ z_3 = z_3 \\ z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = 1 \\ (z_1 + z_2)/\sqrt{2} = 0 \\ (z_1 - z_2)/\sqrt{2} = 0 \end{cases} \implies \begin{cases} z_1 = z_2 = 0 \\ z_3 = 1 \end{cases}$$

Il s'en suit que

$$\boxed{|\phi_3\rangle = |u_3\rangle}$$

<u>Remarque</u> :
Déjà ça se voit que $\lambda_3 = +2a$ est une valeur propre de $\widehat{A}$ associée au vecteur propre $|\phi_3\rangle = |u_3\rangle$.

2) **Quelles valeurs peut-on trouver lorsqu'on mesure l'énergie à l'instant $t = 0$**

Dans notre cas, l'opérateur hamiltonien est décrit par sa représentation matricielle dans une base tridimensionnelle, donc les valeurs qu'on peut trouver lorsqu'on mesure l'énergie à l'instant $t = 0$, ne sont que les valeurs propres de $\widehat{H}$.
D'un autre coté, la matrice $\widehat{H}$ est diagonale, donc elle possède les valeurs (vecteurs) propres comme suit :

- $|\psi_1\rangle = |u_1\rangle$ le vecteur propre associé à $\longrightarrow E_1 = 2\hbar\omega$.
- $|\psi_2\rangle = |u_2\rangle$ le vecteur propre associé à $\longrightarrow E_2 = 2\hbar\omega = E_1$.
- $|\psi_3\rangle = |u_3\rangle$ le vecteur propre associé à $\longrightarrow E_3 = \hbar\omega$.

la valeur propre $2\hbar\omega$ est double tandis que $\hbar\omega$ est simple.

Quelles probabilités lorsqu'on mesure les énergie à l'instant $t = 0$

Tout d'abord, on vérifie que la fonction d'onde, à l'instant $t = 0$, est normée. En fait :

$$\langle\Psi(t=0)|\Psi(t=0)\rangle = \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\right|^2 + \left|\frac{-i}{\sqrt{3}}\right|^2 + \left|\frac{i}{\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = 1$$

donc $|\Psi(t=0)\rangle$ est normé.
Alors

$$\mathcal{P}(E_1 = E_2 = 2\hbar\omega) = \left|\,\langle u_1|\Psi(t=0)\rangle\,\right|^2 + \left|\,\langle u_2|\Psi(t=0)\rangle\,\right|^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$$
$$\mathcal{P}(E_3 = \hbar\omega) = \left|\,\langle u_3|\Psi(t=0)\rangle\,\right|^2 = \frac{1}{3}$$

on vérifie bien que

$$\text{somme des probabilités} = \sum_i \mathcal{P}(E_i) = \mathcal{P}(E_1 = E_2) + \mathcal{P}(E_3) = 1$$

3) **Le ket $|\Psi(t)\rangle$ décrivant l'état du système à un instant t ultérieur**

On applique le postulat ⑥ d'évolution, on écrit :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n\,(t-t_0)}$$

en prenant $t_0 = 0$,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n\,(t)}$$

avec,

$$\boxed{n=1 \implies c_1(0) = \langle u_1||\Psi(t=0)\rangle\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \text{et} \quad E_1 = 2\hbar\omega}$$

$$\boxed{n=2 \implies c_2(0) = \langle u_2||\Psi(t=0)\rangle\rangle = \frac{-i}{\sqrt{3}} \quad \text{et} \quad E_2 = 2\hbar\omega}$$

$$\boxed{n=3 \implies c_3(0) = \langle u_3||\Psi(t=0)\rangle\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} \quad \text{et} \quad E_3 = \hbar\omega}$$

Finalement,

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}\,|u_1\rangle - \frac{i}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}\,|u_2\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}\, e^{-i\omega\, t}\,|u_3\rangle$$

En regardant les états $|\Psi(t)\rangle$ et $|\Psi(t=0)\rangle$, il s'en suit qu'il y a pas un facteur de phase globale entre les deux, i.e. $|\Psi(t)\rangle = e^{i\theta}\,|\Psi(t=0)\rangle$. Donc les états $|\Psi(t)\rangle$ et $|\Psi(t=0)\rangle$ sont physiquement discernables (on peut les séparer).

4) *a*) **À l'instant t, on mesure l'énergie**

Comme le système est conservatif, le résultat de la mesure est l'une des valeurs propres de $\widehat{H}$: $2\hbar\omega$ ou $\hbar\omega$ avec les probabilités :

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(E_1 = E_2 = 2\hbar\omega) &= \left|\langle u_1|\Psi(t)\rangle\right|^2 + \left|\langle u_2|\Psi(t)\rangle\right|^2 = \left|c_1(t)\right|^2 + \left|c_2(t)\right|^2 \\
&= \left|\frac{1}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}\right|^2 + \left|\frac{-i}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}\right|^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3} \\
\mathcal{P}(E_3 = \hbar\omega) &= \left|\langle u_3|\Psi(t)\rangle\right|^2 = \left|c_3(t)\right|^2 \\
&= \left|\frac{i}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}\right|^2 = \frac{1}{3}
\end{aligned}$$

b) **Résultats de mesure de A**

De même, les résultats de mesure sont l'une des valeurs propres de $\widehat{A}$: a, $-a$ ou $2a$.
Tout d'abord il faut noter que :

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(t)\,|u_1\rangle + c_2(t)\,|u_2\rangle + c_3(t)\,|u_3\rangle$$

avec

$$c_1(t) = \frac{1}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}, \quad c_2(t) = -\frac{i}{\sqrt{3}}\, e^{-2i\omega\, t}, \quad c_3(t) = \frac{i}{\sqrt{3}}\, e^{-i\omega\, t}$$

Aussi, il faut rappeler que pour l'opérateur **A** et sa représentation $\widehat{A}$ on a :

$$\begin{aligned}
\lambda_1 = +a &\longrightarrow |\phi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|u_1\rangle + |u_2\rangle\big) \\
\lambda_2 = -a &\longrightarrow |\phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|u_1\rangle - |u_2\rangle\big) \\
\lambda_3 = 2a &\longrightarrow |\phi_3\rangle = |u_3\rangle
\end{aligned}$$

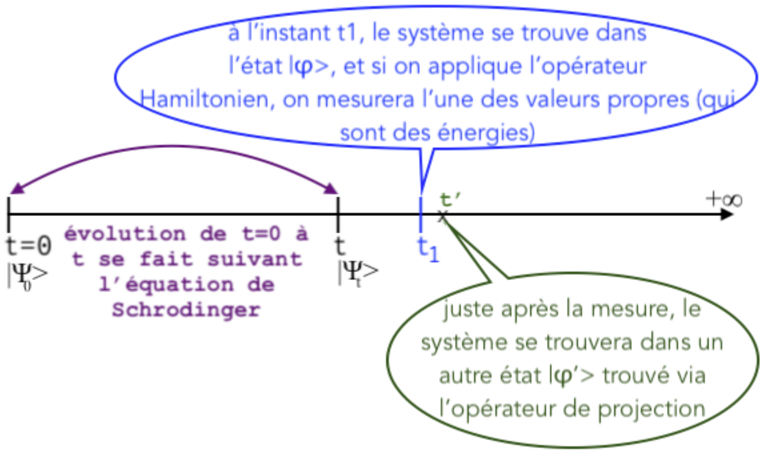
Donc

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(\lambda_1=+a) &= \left|\langle\phi_1|\Psi(t)\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\langle u_1|+\langle u_2|\Big)\Big(c_1(t)|u_1\rangle+c_2(t)|u_2\rangle+c_3(t)|u_3\rangle\Big)\right|^2\\
&= \frac{1}{2}\Big(|c_1(t)|^2+|c_2(t)|^2\Big)=\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\Big)=\frac{1}{3}\\
\mathcal{P}(\lambda_2=-a) &= \left|\langle\phi_2|\Psi(t)\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\langle u_1|-\langle u_2|\Big)\Big(c_1(t)|u_1\rangle+c_2(t)|u_2\rangle+c_3(t)|u_3\rangle\Big)\right|^2\\
&= \frac{1}{2}\Big(|c_1(t)|^2+|c_2(t)|^2\Big)=\frac{1}{2}\Big(\frac{1}{3}+\frac{1}{3}\Big)=\frac{1}{3}\\
\mathcal{P}(\lambda_3=2a) &= \left|\langle\phi_3|\Psi(t)\rangle\right|^2 = \left|\langle u_3|\Big(c_1(t)|u_1\rangle+c_2(t)|u_2\rangle+c_3(t)|u_3\rangle\Big)\right|^2\\
&= \Big(|c_3(t)|^2\Big)=\frac{1}{3}
\end{aligned}$$

$c)$ **La probabilité de trouver le système à l'instant t dans l'état décrit par $|u_3\rangle$**
Cette probabilité se donne par

$$\mathcal{P}=\left|\langle u_3|\Psi(t)\rangle\right|^2=|c_3(t)|^2=\frac{1}{3}$$

5) **On suppose que le résultat d'une mesure de l'énergie à un instant t donne $2\hbar\omega$. L'état du système immédiatement après cette mesure**



en se basant sur le schème ci-dessus, on suppose qu'à un instant $t=t_1$ le système se trouve dans un état $|\phi\rangle$, là où la mesure de l'énergie donne $2\hbar\omega$ comme résultat. Et là, il fallait cependant rappeler que, $2\hbar\omega$ est une valeur propre double associée à deux vecteurs propres qui sont $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$. Donc, à l'instant t', juste après la mesure de l'énergie $=2\hbar\omega$ à l'instant $t=t_1$, le système se trouvera dans l'état :

à l'instant t	à l'instant t'
$\|\Psi\rangle$	$\|\Psi'\rangle=\dfrac{P\|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi\|P\|\Psi\rangle}}$

avec P, l'opérateur de projection orthogonale sur le sous-espace engendré par les vecteurs propres associés à la valeur propre $2\hbar\omega$. Soit :

$$P=|u_1\rangle\langle u_1|+|u_2\rangle\langle u_2|$$

Donc

$$\begin{aligned}
&|\Psi(t)\rangle = c_1(t)\,|u_1\rangle + c_2(t)\,|u_2\rangle + c_3(t)\,|u_3\rangle \\
&\Longrightarrow\ P\,|\Psi(t)\rangle = \Big(|u_1\rangle\langle u_1| + |u_2\rangle\langle u_2|\Big)\Big(c_1(t)\,|u_1\rangle + c_2(t)\,|u_2\rangle + c_3(t)\,|u_3\rangle\Big) \\
&\Longrightarrow\ P\,|\Psi(t)\rangle = c_1(t)\,|u_1\rangle + c_2(t)\,|u_2\rangle
\end{aligned}$$

alors

$$\langle\Psi(t)|\,P\,|\Psi(t)\rangle = \Big(c_1^*(t)\,\langle u_1| + c_2^*(t)\,\langle u_2| + c_3^*(t)\,\langle u_3|\Big)\Big(c_1(t)\,|u_1\rangle + c_2(t)\,|u_2\rangle\Big)$$

$$\Longrightarrow\ \langle\Psi(t)|\,P\,|\Psi(t)\rangle = c_1(t)c_1^*(t) + c_2(t)c_2^*(t) = |c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$$

Par suite

$$\boxed{|\Psi'\rangle = \frac{P\,|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|\,P\,|\Psi\rangle}} = \frac{c_1(t)\,|u_1\rangle + c_2(t)\,|u_2\rangle}{\sqrt{\frac{2}{3}}} \quad \text{avec} \quad c_1(t) = \frac{1}{\sqrt{3}}\,e^{-2i\omega t}, \quad c_2(t) = -\frac{i}{\sqrt{3}}\,e^{-2i\omega t}}$$

Soit finalement :

$$\boxed{|\Psi'\rangle = \frac{e^{-2i\omega t}}{\sqrt{2}}\big(\,|u_1\rangle - |u_2\rangle\,\big)}$$

6) **La grandeur représentée par A est-elle une constante de mouvement.**
Pour que la grandeur physique représentée par l'opérateur **A** soit une constante de mouvement, il faut :

- $[\mathbf{A},\mathbf{H}] = 0$
- $\langle\partial\mathbf{A}/\partial t\rangle = 0$, c-a-d que **A** ne dépend pas explicitement du temps

Par hypothèse, **A** ne dépend pas du temps, et donc $\langle\partial\mathbf{A}/\partial t\rangle = 0$. Il reste à vérifier que $[\mathbf{A},\mathbf{H}] = 0$. Pour ce faire, on a (et on fait la remarque que $\widehat{H}$ est diagonale) :

$$\widehat{H}\widehat{A} = \hbar\,\omega\,a\begin{pmatrix}2&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&2\end{pmatrix} = \hbar\,\omega\,a\begin{pmatrix}0&2&0\\2&0&0\\0&0&2\end{pmatrix}$$

$$\widehat{A}\widehat{H} = \hbar\,\omega\,a\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}2&0&0\\0&2&0\\0&0&1\end{pmatrix} = \hbar\,\omega\,a\begin{pmatrix}0&2&0\\2&0&0\\0&0&2\end{pmatrix}$$

donc $[\mathbf{A},\mathbf{H}] = 0$. Il s'en suit alors que **A** est une constante de mouvement, autrement dit : $\langle\mathbf{A}\rangle_t = cte$

$$\frac{d\langle\mathbf{A}\rangle_t}{dt} = 0$$

c'est le théoreme d'Ehrenfest :

$$\frac{d\langle\mathbf{A}\rangle_t}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[\mathbf{A},\mathbf{H}]\rangle + \langle\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\rangle$$

Solution 2: *Système conservatif*

Soit un système conservatif de masse m dont l'état quantique, à l'instant $t = 0$, est décrit par le ket suivant :

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{n=0}^{3} c_n(t=0)\,|\Phi_n\rangle = \frac{1}{2}\,|\Phi_0\rangle - \frac{i}{2\sqrt{2}}\,|\Phi_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}\,|\Phi_2\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}\,|\Phi_3\rangle$$

les kets $|\Phi_n\rangle$ sont des états propres de l'hamiltonien **H** du système associés aux valeurs propres E_n

(donnant les énergies possibles du système) et telle que :

$$\mathbf{H}\,|\Phi_n\rangle = E_n\,|\Phi_n\rangle \quad \text{avec} \quad E_n = \hbar\omega\,(n+\frac{1}{2}) \quad n \in \mathbb{N}^*$$

Tout d'abord, notons que

$$\langle|\Psi(t=0)\rangle||\Psi(t=0)\rangle\rangle = \sum_{n=0}^{3}|c_n(t=0)|^2 = \frac{1}{4}+\frac{1}{8}+\frac{1}{2}+\frac{1}{8} = 1$$

1) **La probabilité $\mathcal{P}_{t=0}$, lorsqu'on mesure l'énergie du système dans $|\Psi(t=0)\rangle$, de trouver la valeur** $5\hbar\omega/2$
La valeur d'énergie $5\hbar\omega/2 = E_2$ correspond à $\rightarrow |\Phi_2\rangle$.
Alors, postulat de mesure ④ $\Longrightarrow$

$$\mathcal{P}_{t=0}(E_2 = 5\hbar\omega/2) = \Big|\,\langle\Phi_2|\Psi(t=0)\rangle\,\Big|^2 = |c_2(t=0)|^2 = \Big|\frac{i}{\sqrt{2}}\Big|^2 = \frac{1}{2}$$

2) **La valeur moyenne de l'énergie du système dans l'état** $|\Psi(t=0)\rangle = |\Psi(0)\rangle$.
Par définition, cette valeur moyenne de l'énergie s'écrit :

$$\langle H\rangle_0 = \langle\Psi(0)|H|\Psi(0)\rangle$$

on a

$$H\,|\Psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{3} c_n(t=0)\,H\,|\Phi_n\rangle = E_n\sum_{n=0}^{3} c_n(t=0)\,|\Phi_n\rangle$$

d'où

$$\langle\Psi(0)|H|\Psi(0)\rangle = E_n\sum_{n=0}^{3}|c_n(t=0)|^2\,\underbrace{\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle}_{=1}$$

soit donc

$$\langle H\rangle_0 = \hbar\omega\,(0+\frac{1}{2})\times\frac{1}{4}+\hbar\omega\,(1+\frac{1}{2})\times\frac{1}{8}+\hbar\omega\,(2+\frac{1}{2})\times\frac{1}{2}+\hbar\omega\,(3+\frac{1}{2})\times\frac{1}{8} = 2\hbar\omega$$

L'écart quadratique moyen : $(\Delta H)_0 = \sqrt{\langle H^2\rangle_0 - \langle H\rangle_0^2}$
On a

$$(\Delta H)_0^2 = \langle H^2\rangle_0 - \langle H\rangle_0^2 \quad \text{avec} \quad \langle H^2\rangle_0 = \langle\Psi(0)|H^2|\Psi(0)\rangle$$

alors, comme précédemment, sauf qu'ici l'opérateur Hamiltonien s'applique deux fois

$$H^2\,|\Psi(0)\rangle = H\,\underbrace{H\,|\Psi(0)\rangle}_{=E_n\sum_{n=0}^{3}c_n(t=0)|\Phi_n\rangle} = E_n\sum_{n=0}^{3}c_n(t=0)\,\underbrace{H|\Phi_n\rangle}_{=E_n|\Phi_n\rangle} = E_n^2\sum_{n=0}^{3}c_n(t=0)\,|\Phi_n\rangle$$

d'où

$$\langle\Psi(0)|H^2|\Psi(0)\rangle = E_n^2\sum_{n=0}^{3}|c_n(t=0)|^2\,\underbrace{\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle}_{=1}$$

on trouvera alors

$$\langle H^2\rangle_0 = E_0^2|c_0(t=0)|^2+E_1^2|c_1(t=0)|^2+E_2^2|c_2(t=0)|^2+E_3^2|c_3(t=0)|^2 = 5(\hbar\omega)^2$$

Finalement,

$$(\Delta H)_0^2 = 5(\hbar\omega)^2-(2\hbar\omega)^2 = (\hbar\omega)^2 \Longrightarrow \boxed{(\Delta H)_0 = \hbar\omega}$$

3) **Maintenant on étudie le système à un instant** t

a) **Le vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ à l'instant t**
H était observable $\Longrightarrow$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\Phi_n\rangle \quad \text{avec} \quad c_n(t) = \langle\Phi_n|\Psi(t)\rangle$$

Système conservatif $\Longrightarrow$

$$c_n(t) = c_n(t=0)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

Il s'en suit alors,

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{2}e^{-i\frac{\omega}{2}t}\,|\Phi_0\rangle - \frac{i}{2\sqrt{2}}e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\,|\Phi_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{5\omega}{2}t}\,|\Phi_2\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}e^{-i\frac{7\omega}{2}t}\,|\Phi_3\rangle$$

et notons que $|c_n(t)| = |c_n(t=0)|$ et $\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \sum|c_n(t)|^2 = \sum|c_n(t=0)|^2 = 1$.

b) **Calcul de : Probabilité, Valeur moyenne et l'Écart quadratique moyen de l'énergie à l'instant t**
∘ Si on mesure de nouveau la valeur d'énergie $5\hbar\omega/2 = E_2$ à l'instant t (où le système est décrit par l'état $|\Psi(t)\rangle$), toujours d'après le postulat de mesure ④ $\Longrightarrow$

$$\mathcal{P}_t(E_2 = 5\hbar\omega/2) = \Big|\,\langle\Phi_2|\Psi(t)\rangle\,\Big|^2 = \big|c_2(t)\big|^2 = \Big|\frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{5\omega}{2}t}\Big|^2 = \frac{1}{2} = \mathcal{P}_{t=0}(E_2 = 5\hbar\omega/2)$$

∘ Pour la valeur moyenne, on procède exactement comme précédemment, on écrit :

$$\langle H\rangle_t = \langle\Psi(t)|H|\Psi(t)\rangle = E_n\sum_{n=0}^{3}\big|c_n(t)\big|^2\underbrace{\langle\Phi_n|\Phi_n\rangle}_{=1} = E_n\sum_{n=0}^{3}\big|c_n(t=0)\big|^2 = \langle H\rangle_0$$

∘ Pour l'écart quadratique, on a

$$(\Delta H)_t = (\Delta H)_0 = \hbar\omega$$

puisque

$$\langle H^2\rangle_t = \langle\Psi(t)|H^2|\Psi(t)\rangle = E_n^2\sum_{n=0}^{3}\big|c_n(t)\big|^2 = E_n^2\sum_{n=0}^{3}\big|c_n(t=0)\big|^2 = \langle H^2\rangle_0$$

Ces résultats sont prévisibles car l'énergie est une constante de mouvement (système conservatif).

4) **On suppose que le résultat d'une mesure de l'énergie donne $7\hbar\omega/2$. Quel est l'état du système immédiatement après la mesure**
La valeur d'énergie $E = 7\hbar\omega/2 \quad\Longrightarrow\quad n = 3$ et donc associée à $|\Phi_3\rangle$ et obtenue avec une probabilité

$$\mathcal{P}_t(E_3 = 7\hbar\omega/2) = \Big|\,\langle\Phi_3|\Psi(t)\rangle\,\Big|^2 = \big|c_3(t)\big|^2 = \Big|\frac{1}{2\sqrt{2}}e^{-i\frac{7\omega}{2}t}\Big|^2 = \frac{1}{8}$$

l'état du système immédiatement après la mesure et d'après le postulat ⑤ de réduction du vecteur d'état

$$\frac{P_3\,|\Psi(t)\rangle}{\sqrt{\langle\Psi(t)|\,P_3\,|\Psi(t)\rangle}} = |\chi\rangle \quad \text{avec} \quad P_3 = |\Phi_3\rangle\langle\Phi_3| \;\; (\text{notons que}\, E_3 = \frac{7\hbar\omega}{2}\,\text{est une}\ V_p\ \text{non-dégénérée})$$

alors

$$P_3\,|\Psi(t)\rangle = |\Phi_3\rangle\langle\Phi_3|\left(\frac{1}{2}e^{-i\frac{\omega}{2}t}\,|\Phi_0\rangle - \frac{i}{2\sqrt{2}}e^{-i\frac{3\omega}{2}t}\,|\Phi_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{5\omega}{2}t}\,|\Phi_2\rangle + \frac{1}{2\sqrt{2}}e^{-i\frac{7\omega}{2}t}\,|\Phi_3\rangle\right)$$

comme $\langle\Phi_3|\Phi_0\rangle = \langle\Phi_3|\Phi_1\rangle = \langle\Phi_3|\Phi_2\rangle = 0$ et $\langle\Phi_3|\Phi_3\rangle = 1$, il nous reste alors,

$$P_3\,|\Psi(t)\rangle = c_3(t)\,|\Phi_3\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2}}e^{-i\frac{7\omega}{2}\,t}\,|\Phi_3\rangle$$

Or

$$\langle\Psi(t)|\,P_3\,|\Psi(t)\rangle = |c_3(t)|^2 = \frac{1}{8}$$

Il ressort de ce qui précède alors que :

$$\boxed{|\chi\rangle = e^{-i\frac{7\omega}{2}\,t}\,|\Phi_3\rangle \equiv |\Phi_3\rangle}$$

la dernière équivalence est basée sur le fait que $e^{-i\frac{7\omega}{2}\,t}$ est un facteur de phase global et sans signification physique.
Que trouve-t-on si on mesure à nouveau l'énergie
Le système étant dans l'état $|\Phi_3\rangle$; si on mesure à nouveau l'énergie, on trouverait $E_3 = 7\hbar\omega/2$ MAIS cette fois avec une probabilité

$$\mathcal{P}_{t'}(E_3 = 7\hbar\omega/2) = \Big|\langle\Phi_3|\chi(t)\rangle\Big|^2 = \Big|\langle\Phi_3|\Phi_3\rangle\Big|^2 = 1$$

c'est-à-dire avec certitude.

$$|\Psi_t\rangle \xrightarrow{E_3} |\chi\rangle \equiv |\Phi_3\rangle \xrightarrow{E_3} |\Phi_3\rangle$$

$$\mathcal{P}(E_3) = |\langle\Phi_3|\Psi_t\rangle|^2 = 1/8 \qquad \mathcal{P}(E_3) = |\langle\Phi_3|\chi\rangle|^2 = 1$$

Solution 3: *Particule dans un champ électromagnétique* **(facultatif)**

Partie 1 :
L'hamiltonien $\mathbf{H}$ de la particule de masse m et de charge q s'écrit :

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{P}}) = \frac{1}{2m}\left[\vec{\mathbf{P}} - q\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{R}})\right]^2 \tag{1}$$

avec $\vec{\mathcal{B}}$ et $\vec{\mathcal{A}}$ représentent respectivement les observables associées aux champ magnétique $\vec{\mathcal{B}}$ et potentiel vecteur $\vec{\mathcal{A}}$.

1) **Calcul des commutateurs :** $[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y]$, $[\mathbf{V}_y, \mathbf{V}_z]$, $[\mathbf{V}_z, \mathbf{V}_x]$.
On a

$$\vec{\mathbf{P}} = m\vec{\mathbf{V}} + q\vec{\mathbf{A}} \implies m\vec{\mathbf{V}} = \vec{\mathbf{P}} - q\vec{\mathbf{A}} \implies \vec{\mathbf{V}} = \frac{\vec{\mathbf{P}} - q\vec{\mathbf{A}}}{m}$$

Il s'en suit que

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{R}}) = \frac{1}{2m}\left[m\vec{\mathbf{V}}\right]^2 = \frac{1}{2}m\vec{\mathbf{V}}^2 \tag{2}$$

c'est-à-dire que $\mathbf{H}$ se réduit à son énergie cinétique. D'autre part, en représentation matricielle, les vecteurs $\vec{\mathbf{A}}$, $\vec{\mathbf{P}}$ et $\vec{\mathbf{V}}$ s'écrivent :

$$\vec{\mathbf{A}}\begin{pmatrix}0\\ B\mathbf{X}\\ 0\end{pmatrix},\quad \vec{\mathbf{P}}\begin{pmatrix}\mathbf{P}_x\\ \mathbf{P}_y\\ \mathbf{P}_z\end{pmatrix} \implies \vec{\mathbf{V}}\begin{pmatrix}\mathbf{V}_x = \frac{\mathbf{P}_x}{m}\\ \mathbf{V}_y = \frac{\mathbf{P}_y}{m} - \frac{qB}{m}\mathbf{X}\\ \mathbf{V}_z = \frac{\mathbf{P}_z}{m}\end{pmatrix} \tag{3}$$

et donc le calcul des commutateurs donne :

$$
\begin{aligned}
[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y] &= [\frac{\mathbf{P}_x}{m}, \frac{\mathbf{P}_y}{m} - \frac{q\mathbf{B}}{m}\mathbf{X}] \\
&= \frac{1}{m^2}\underbrace{\cancel{[\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y]}}_{=0} - \frac{qB}{m^2}\underbrace{[\mathbf{P}_x, \mathbf{X}]}_{=-i\hbar\mathbb{1}} \\
&= \frac{qB}{m^2} i\hbar\mathbb{1} \qquad (4) \\
[\mathbf{V}_y, \mathbf{V}_z] &= [\frac{\mathbf{P}_y}{m} - \frac{q\mathbf{B}}{m}\mathbf{X}, \frac{\mathbf{P}_z}{m}] \\
&= \frac{1}{m^2}\underbrace{\cancel{[\mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z]}}_{=0} - \frac{qB}{m^2}\underbrace{\cancel{[\mathbf{X}, \mathbf{P}_z]}}_{=0} \\
&= 0 \qquad (5) \\
[\mathbf{V}_z, \mathbf{V}_x] &= [\frac{\mathbf{P}_z}{m}, \frac{\mathbf{P}_x}{m}] \\
&= \frac{1}{m^2}\underbrace{\cancel{[\mathbf{P}_z, \mathbf{P}_x]}}_{=0} \\
&= 0 \qquad (6)
\end{aligned}
$$

Là, on signale que $[\mathbf{X}, \mathbf{P}_z] = 0$ puisque l'opérateur position dans la direction x, $\mathbf{X}$, est indépendant de l'opérateur impulsion dans la direction y, $\mathbf{P}_z$, et cela se dit pour les autres.

Calcul des commutateurs : $[\mathbf{R}_\alpha, \mathbf{V}_\alpha]$ **avec** $\alpha = x, y, z$.

$$
\begin{aligned}
[\mathbf{X}, \mathbf{V}_x] &= \left[\mathbf{X}, \frac{\mathbf{P}_x}{m}\right] = +\frac{i\hbar}{m}\mathbb{1} \\
[\mathbf{Y}, \mathbf{V}_y] &= \left[\mathbf{Y}, \frac{\mathbf{P}_y}{m} - \frac{q\mathbf{B}}{m}\mathbf{X}\right] = \left[\mathbf{Y}, \frac{\mathbf{P}_y}{m}\right] - \frac{q\mathbf{B}}{m}\underbrace{\cancel{[\mathbf{Y}, \mathbf{X}]}}_{=0} = +\frac{i\hbar}{m}\mathbb{1} \\
[\mathbf{Z}, \mathbf{V}_z] &= \left[\mathbf{Z}, \frac{\mathbf{P}_z}{m}\right] = +\frac{i\hbar}{m}\mathbb{1}
\end{aligned}
$$

2) **Le théorème de Heisenberg**
Soit deux grandeurs physiques $\mathcal{C}$ et $\mathcal{D}$ associées à deux observables **C** et **D**:

$$\Delta\mathcal{C}.\Delta\mathcal{D} \geq \frac{1}{2}|\langle[\mathbf{C}, \mathbf{D}]\rangle| \quad (*)$$

Déduction
Dans l'équation $(*)$ on prend :

$$C = \mathbf{X},\ \mathbf{Y},\ \mathbf{Z} \qquad (7)$$
$$D = \mathbf{V}_x,\ \mathbf{V}_y,\ \mathbf{V}_z \qquad (8)$$

Donc cela donne :

$$
\begin{aligned}
\Delta x.\Delta v_x \geq \frac{1}{2}|\langle[\mathbf{X}, \mathbf{V}_x]\rangle| &\implies \Delta x.\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m} \\
\Delta y.\Delta v_y \geq \frac{1}{2}|\langle[\mathbf{Y}, \mathbf{V}_y]\rangle| &\implies \Delta y.\Delta v_y \geq \frac{\hbar}{2m} \\
\Delta z.\Delta v_z \geq \frac{1}{2}|\langle[\mathbf{Z}, \mathbf{V}_z]\rangle| &\implies \Delta z.\Delta v_z \geq \frac{\hbar}{2m}
\end{aligned}
$$

avec $\vec{\mathbf{P}} = m\vec{\mathbf{V}}$, donc

$$\Delta r.\Delta p_r = m\,\Delta r.\Delta v_r \geq \frac{\hbar}{2m}.m = \frac{\hbar}{2} \quad \text{avec } r = x, y, z$$

3) **Théorème d'Ehrenfest :**

L'évolution des valeurs moyennes d'une observable $\mathbf{A}$ dans le temps est donnée par :

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{A}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [\mathbf{A}, \mathbf{H}]\rangle + \langle \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\rangle$$

Cette évolution provient de deux termes différents : le premier est lié à la non-commutation de l'observable avec l'Hamiltonien H du système, alors que le second représente la dépendance *explicite* de l'observable $\mathbf{A}$ en fonction de la variable t.

a) Calcul de $d\langle\vec{r}\rangle/dt$
Normalement

$$\frac{d\langle\vec{r}\rangle}{dt} \longrightarrow \text{vitesse}$$

or $\vec{r}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$ les observables ne dépendent pas explicitement du temps $\Longrightarrow$ $\langle\frac{\partial r}{\partial t}\rangle = 0$. Le théorème d'Ehrenfest est réduit à (on prend le cas de la composante x):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle x\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\mathbf{X}, \mathbf{H}]\rangle \quad \text{avec} \quad \mathbf{H}\left|\begin{matrix} m\mathbf{V}_x^2/2 \\ m\mathbf{V}_y^2/2 \\ m\mathbf{V}_z^2/2 \end{matrix}\right. \\ &= \frac{m}{2i\hbar}\langle[\mathbf{X}, \mathbf{V}_x^2 + \mathbf{V}_y^2 + \mathbf{V}_z^2]\rangle \end{aligned}$$

or

$$\begin{aligned} &[\mathbf{X}, \mathbf{V}_x^2] = [\mathbf{X}, \mathbf{V}_x]\mathbf{V}_x + \mathbf{V}_x[\mathbf{X}, \mathbf{V}_x] = \frac{i\hbar}{m}\mathbf{V}_x + \frac{i\hbar}{m}\mathbf{V}_x = \frac{2i\hbar}{m}\mathbf{V}_x \\ &[\mathbf{X}, \mathbf{V}_y^2] = [\mathbf{X}, \mathbf{V}_z^2] = 0 \end{aligned}$$

donc

$$\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \frac{m}{2i\hbar}.\frac{2i\hbar}{m}\mathbf{V}_x \quad \Longrightarrow \quad \boxed{\frac{d}{dt}\langle x\rangle = \mathbf{V}_x}$$

la même chose pour $\mathbf{Y}$ et $\mathbf{Z}$.

$$\boxed{\frac{d}{dt}\langle y\rangle = \mathbf{V}_y} \quad \text{et} \quad \boxed{\frac{d}{dt}\langle z\rangle = \mathbf{V}_z}$$

b) Calcul de $m\,d\langle\vec{v}\rangle/dt$
Normalement

$$\frac{m\,d\langle\vec{v}\rangle}{dt} \longrightarrow \text{force} \sim q\vec{V}\wedge\vec{B}$$

et donc

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \mathbf{V}_x\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\mathbf{V}_x, \mathbf{H}]\rangle \quad \text{avec} \quad \mathbf{H}\left|\begin{matrix} m\mathbf{V}_x^2/2 \\ m\mathbf{V}_y^2/2 \\ m\mathbf{V}_z^2/2 \end{matrix}\right. \\ &= \frac{m}{2i\hbar}\langle[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_x^2 + \mathbf{V}_y^2 + \mathbf{V}_z^2]\rangle = \frac{m}{2i\hbar}\langle[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_x^2] + [\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y^2] + [\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_z^2]\rangle \end{aligned}$$

avec

$$
\begin{aligned}
&[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_x^2] = 0 \\
&[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y^2] = \mathbf{V}_y\,[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y] + [\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y]\mathbf{V}_y = \frac{2i\hbar\, q\, B}{m^2}\mathbf{V}_y \quad \text{d'après (4)} \\
&[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_z^2] = \mathbf{V}_z\,[\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_z] + [\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_z]\mathbf{V}_z = 0 \quad \text{d'après (6)}
\end{aligned} \tag{9}
$$

par suite

$$
\begin{aligned}
&\frac{d}{dt}\langle \mathbf{V}_x\rangle = \frac{m}{2i\hbar}\langle \frac{2i\hbar\, q\, B}{m^2}\mathbf{V}_y\rangle = \frac{q\,B}{m}\langle \mathbf{V}_y\rangle \\
&\Longrightarrow \boxed{m\frac{d}{dt}\langle \mathbf{V}_x\rangle = q\,B\,\langle \mathbf{V}_y\rangle}
\end{aligned} \tag{10}
$$

de même, on trouve :

$$
\boxed{m\frac{d}{dt}\langle \mathbf{V}_y\rangle = -q\,B\,\langle \mathbf{V}_x\rangle} \quad \text{et} \quad \boxed{m\frac{d}{dt}\langle \mathbf{V}_z\rangle = 0}
$$

Dans l'autre coté, le calcul des composante de la force $\vec{F} = q\vec{V} \wedge \vec{B}$ donne :

$$
q\vec{V} \wedge \vec{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{V}_x \\ \mathbf{V}_y \\ \mathbf{V}_z \end{vmatrix} \wedge \begin{vmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} q\,B\,\mathbf{V}_y \\ -q\,B\,\mathbf{V}_x \\ 0 \end{vmatrix} \quad \text{qui représentent les trois composantes de la force } \vec{\mathbf{F}}
$$

c-à-d :

$$
\vec{\mathbf{F}} \left| \begin{aligned}
\langle \mathbf{F}_x\rangle &= m\,\frac{d\langle \mathbf{V}_x\rangle}{dt} = +q\,B\,\langle \mathbf{V}_y\rangle \\
\langle \mathbf{F}_y\rangle &= m\,\frac{d\langle \mathbf{V}_y\rangle}{dt} = -q\,B\,\langle \mathbf{V}_x\rangle \\
\langle \mathbf{F}_z\rangle &= m\,\frac{d\langle \mathbf{V}_z\rangle}{dt} = 0
\end{aligned} \right.
$$

Interpretation :
Il s'en suit que le théorème d'Ehrenfest en mécanique quantique reproduit les lois de la physique classique.

Partie 2 :
On considère maintenant que la particule, en plus du champ magnétique $\vec{\mathcal{B}}$, est soumise à un champ électrique $\vec{\mathcal{E}}$.
En mécanique classique, la grandeur $\mathcal{H}$, fonction de Hamilton, associée à l'énergie de la particule s'écrit :

$$
\mathcal{H}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}, t) = \frac{1}{2m}\left[\vec{\mathbf{p}} - q\vec{\mathcal{A}}(\vec{\mathbf{r}}, t)\right]^2 + q\,\mathcal{U}(\vec{\mathbf{r}}, t) \tag{11}
$$

où $\vec{p}$ est l'impulsion et $\vec{r}$ la position de la particule. $\vec{\mathcal{A}}$ et $\mathcal{U}$ sont les potentiels vecteur et scalaire dont dérivent $\vec{\mathcal{B}}$ et $\vec{\mathcal{E}}$ respectivement.

1) **Observable H représentant la grandeur $\mathcal{H}$.**
L'équation (11), en détaillant le terme entre crochets, se ré-écrit :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}(\vec{\mathbf{r}}, \vec{\mathbf{p}}, t) &= \frac{1}{2m}\left[\vec{\mathbf{p}} - q\vec{\mathcal{A}}(\vec{\mathbf{r}}, t)\right]^2 + q\,\mathcal{U}(\vec{\mathbf{r}}, t) \\
&= \frac{1}{2m}\left[\mathbf{p}^2 - 2\,q\,\vec{\mathbf{p}}.\vec{\mathcal{A}} + q^2\,\mathcal{A}^2\right] + q\,\mathcal{U} \\
&= \frac{1}{2m}\left[\mathbf{p}^2 - q\,(\vec{\mathbf{p}}.\vec{\mathcal{A}} + \vec{\mathcal{A}}.\vec{\mathbf{p}}) + q^2\,\mathcal{A}^2\right] + q\,\mathcal{U} \quad \text{(symétrisation)}
\end{aligned} \tag{12}
$$

et d'après le principe de correspondance $\rightarrow$

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathbf{H}, \quad \vec{\mathbf{p}} \rightarrow \vec{\mathbf{P}}, \quad \vec{\mathbf{r}} \rightarrow \vec{\mathbf{R}}, \quad \vec{\mathcal{A}} \rightarrow \vec{\mathbf{A}}, \quad \mathcal{U} \rightarrow \mathbf{U}.$$

Soit donc :

$$\mathbf{H}(\vec{\mathbf{R}}, \vec{\mathbf{P}}, t) = \frac{1}{2m}\left[\mathbf{P}^2 - q\left(\vec{\mathbf{P}}.\vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{R}}, t) + \vec{\mathbf{A}}(\vec{\mathbf{R}}, t).\vec{\mathbf{P}}\right) + q^2\,\mathbf{A}^2\right] + q\,\mathbf{U}(\vec{\mathbf{R}}, t) \tag{13}$$

avec $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}_x^2 + \mathbf{P}_y^2 + \mathbf{P}_z^2$

2) **L'équation de Schrödinger en représentation position**

l'équation de Schrödinger s'écrit en général comme :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_t\rangle = \mathbf{H}\,|\psi_t\rangle$$

en représentation $\{\vec{r}\}$ $\Longrightarrow$

$$\langle\vec{r}|\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_t\rangle = \langle\vec{r}|\,\mathrm{H}|\psi_t\rangle$$

or, on sait que :

$$\langle\vec{r}|\,\vec{P}\,|\psi_t\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi_t(\vec{r}) \;\Longrightarrow\; \langle\vec{r}|\,\vec{P}^2\,|\psi_t\rangle = -\hbar^2\Delta\psi_t(\vec{r})$$

de même, on sait que :

$$\left.\begin{array}{l}\langle\vec{r}|\,\vec{R}\,|\psi_t\rangle = \vec{r}\,\langle\vec{r}|\psi_t\rangle = \vec{r}\,\psi_t(\vec{r})\\ \langle\vec{r}|\,F(\vec{R})\,|\psi_t\rangle = F(\vec{r})\,\langle\vec{r}|\psi_t\rangle = \mathcal{F}(\vec{r})\,\psi_t(\vec{r})\end{array}\right\}\text{ Opérateurs multiplicatifs}$$

où $\mathcal{F}$ est la fonction grandeur représentée par la fonction **F** d'opérateurs. Aussi,

$$\langle\vec{r}|\, i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi_t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\vec{r}|\psi_t\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi_t(\vec{r})$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi_t(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\Delta\psi_t(\vec{r}) - \frac{q}{2\,m}\,\frac{\hbar}{i}\left[\vec{\nabla}.\vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, t) + \vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, t).\vec{\nabla}\right]\psi_t(\vec{r}) + \frac{q^2}{2\,m}\mathcal{A}^2(\vec{r}, t)\psi_t(\vec{r}) + q\,\mathcal{U}(\vec{r}, t)\psi_t(\vec{r})$$

que l'on peut écrire :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\psi_t(\vec{r}) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\Delta - \frac{q\,\hbar}{2\,m\,i}\,div\vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, t) - \frac{q\,\hbar}{2\,m\,i}\vec{\mathcal{A}}(\vec{r}, t)\vec{grad} + \frac{q^2}{2\,m}\,\mathcal{A}^2(\vec{r}, t) + q\,\mathcal{U}(\vec{r}, t)\right\}\psi_t(\vec{r})$$

Remarque :

On peut calculer $\langle\vec{r}|\,\vec{A}(\vec{R}).\vec{P}\,|\psi\rangle$ en utilisant la relation de fermeture :

$$\langle\vec{r}|\,\vec{A}(\vec{R}).\vec{P}\,|\psi\rangle = \int \langle\vec{r}|\,\vec{A}(\vec{R})|\vec{r}\,'\rangle\,\langle\vec{r}\,'|\,\vec{P}\,|\psi\rangle\; d^3\vec{r}\,'$$

$$\text{avec}\quad \langle\vec{r}\,'|\,\vec{P}\,|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,') \quad\text{et}\quad \langle\vec{r}|\,\vec{A}(\vec{R})\,|\vec{r}\,'\rangle = \vec{A}(\vec{r})\,\underbrace{\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle}_{=\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')}$$

et donc,

$$\langle\vec{r}|\,\vec{A}(\vec{R}).\vec{P}\,|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\int \vec{A}(\vec{r})\,\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r}\,')\,d^3\vec{r}\,' = \frac{\hbar}{i}\,\vec{A}(\vec{r})\,\vec{\nabla}\psi(\vec{r})$$

on peut procéder de la meme manière pour $\langle\vec{r}|\,\vec{P}.\vec{A}(\vec{R})\,|\psi\rangle$.