



Physique quantique

A. Belhboub

anouar.belhboub@centrale-casablanca.ma

Année universitaire 2023/2024

Références

- « Mécanique quantique » Tome 1, Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloë, Savoires actuels, EDP Sciences/CNRS Editions
- « Quantum physics », F. Scheck, Springer

Travail en autonomie

Développement de l'opérateur Hamiltonien (somme des composantes énergétiques) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité pour le traitement des systèmes atomiques et moléculaires

(Ce travail sera considéré dans l'examen final)

Partie I: Fonction d'onde et équation de Schrödinger

Objectif global

Cette partie traite la notion de fonction d'onde et son rôle dans la description quantique des systèmes physiques par la résolution de l'équation de Schrödinger.

Sommaire

- Equation de Schrödinger
- Interprétation statistique
- Normalisation
- Etats stationnaires

Equation de Schrödinger

Imaginons une particule de masse m , contrainte de se déplacer le long de l'axe des x , soumise à une force spécifiée $F(x, t)$ (figure).

L'objectif de la mécanique classique est de déterminer la position de la particule à un instant donné : $x(t)$.

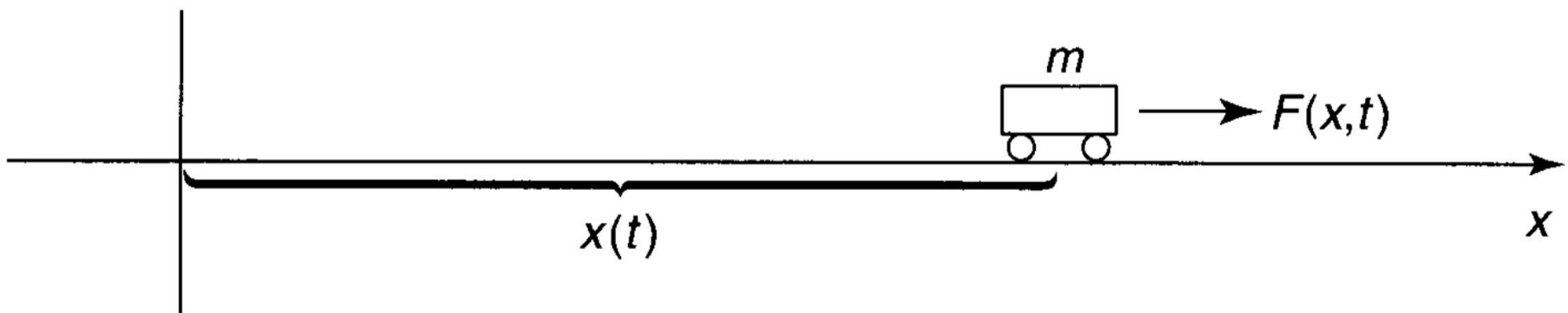


Figure: Une « particule » contrainte de se déplacer dans une dimension sous l'influence d'une certaine force.

Equation de Schrödinger

Une fois que nous savons cela, nous pouvons déterminer la vitesse ($v = dx/dt$), la quantité de mouvement ($p = mv$), l'énergie cinétique ($T = \frac{1}{2}mv^2$), ou toute autre variable dynamique d'intérêt.

Comment fait-on pour déterminer $x(t)$?

On applique la deuxième loi de Newton : $F = ma$. La force peut être exprimée comme la dérivée d'une fonction d'énergie potentielle, $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$, et la loi de Newton s'écrit:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

Ceci, associé aux conditions initiales appropriées (généralement la position et la vitesse à $t = 0$), détermine $x(t)$.

Equation de Schrödinger

La mécanique quantique aborde ce même problème tout à fait différemment. Dans ce cas, ce que nous recherchons est la fonction d'onde, $\Psi(x, t)$, de la particule, et nous l'obtenons en résolvant l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

Avec, $\hbar = h/2\pi = 1.054573 \times 10^{-34}$ J.s est la constante de Planck modifiée.

L'équation de Schrödinger joue un rôle logiquement analogue à la seconde loi de Newton : étant donné des conditions initiales appropriées (typiquement, $\Psi(x, 0)$), l'équation de Schrödinger détermine $\Psi(x, t)$ pour tout temps futur, tout comme, en mécanique classique, la loi de Newton détermine $x(t)$ pour tout temps futur.

Interprétation statistique

Mais qu'est-ce que c'est exactement que cette "fonction d'onde", et qu'est-ce qu'elle apporte une fois obtenue ?

Après tout, une particule, de par sa nature, est localisée en un point, alors que la fonction d'onde (comme son nom l'indique) est étalée dans l'espace (c'est une fonction de x , pour un temps t donné). Comment peut-on dire qu'un tel objet décrit l'état d'une particule ?

La réponse est fournie par l'interprétation statistique de Born de la fonction d'onde, qui dit que $|\Psi(x, t)|^2$ donne la probabilité de trouver la particule au point x au temps t , ou plus précisément:

$$|\Psi(x, t)|^2 dx = \left\{ \begin{array}{l} \text{la probabilité de trouver la particule} \\ \text{entre } x \text{ et } x + dx, \text{ au temps } t \end{array} \right\}$$

N.B.: La fonction d'onde elle-même est complexe, mais $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (où Ψ^* est le conjugué complexe de Ψ) est réel et non négatif- comme une probabilité, bien sûr, doit l'être.

Interprétation statistique

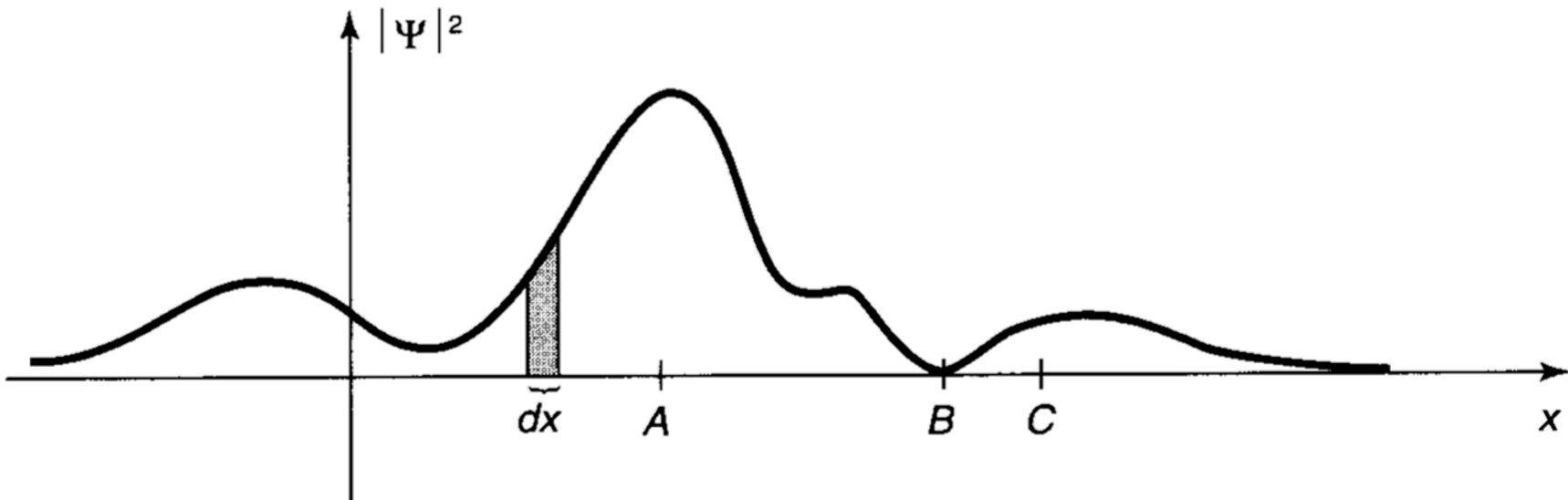


Figure: Une fonction d'onde typique. La particule serait relativement susceptible d'être trouvée près de A, et peu susceptible d'être trouvée près de B. La zone ombrée représente la probabilité de trouver la particule dans la plage dx .

Pour la fonction d'onde montrée sur la figure, il est fort probable de trouver la particule au voisinage du point A, et relativement peu probable de la trouver près du point B.

L'interprétation statistique introduit une sorte d'indétermination dans la physique quantique, car même si on sait tout ce que la théorie peut nous dire sur la particule (à savoir, sa fonction d'onde), on ne peut pas prédire avec certitude le résultat d'une simple expérience pour mesurer sa position. Tout ce que la physique quantique peut offrir est une information statistique sur les résultats possibles.

Interprétation statistique

Supposons qu'on mesure la position de la particule et qu'on trouve qu'elle est au point C. Si nous faisons deux mesures consécutives : une seconde mesure, immédiatement après la première, devrons-nous obtenir C à nouveau ? ou l'acte de mesure crache-t-il un nombre complètement nouveau à chaque fois ?

Sur cette question tout le monde est d'accord : Une mesure répétée (sur la même particule) doit renvoyer la même valeur. En effet, il serait difficile de prouver que la particule s'est réellement trouvée en C dans un premier temps si cela ne pouvait être confirmé par la répétition immédiate de la mesure.

Comment l'interprétation statistique rend-elle compte du fait que la seconde mesure doit forcément donner la valeur C ?

Interprétation statistique

Évidemment, la première mesure modifie radicalement la fonction d'onde, de sorte qu'elle est maintenant fortement centrée autour de C (figure).



Figure: Réduction de la fonction d'onde : après la première mesure, le graphe de $|\Psi|^2$ a immédiatement trouvé la particule au point C.

On dit que la fonction d'onde s'effondre lors de la mesure, jusqu'à un pic au point C (Ψ s'étalera bientôt à nouveau, conformément à l'équation de Schrödinger, donc la deuxième mesure doit être faite rapidement). Il y a donc deux types distincts de processus physiques: les "ordinaires", dans lesquels la fonction d'onde évolue tranquillement selon l'équation de Schrödinger, et les "mesures", dans lesquelles Ψ s'effondre brusquement et de façon discontinue.

Normalisation

Comme énoncé avant, l'interprétation statistique de la fonction d'onde dit que $|\Psi(x, t)|^2$ est la densité de probabilité pour trouver la particule au point x , à l'instant t . Il s'ensuit que l'intégrale de $|\Psi|^2$ sur tout l'espace doit être égale à 1 (la particule doit exister quelque part):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1)$$

Sans cela, l'interprétation statistique n'aurait aucun sens.

Cependant, cette exigence devrait être vérifiée : Après tout, la fonction d'onde est supposée être déterminée par l'équation de Schrödinger -- on ne peut pas imposer une condition aussi forte sur Ψ sans vérifier que les deux sont cohérentes.

Normalisation

De la forme de l'équation de Schrödinger, on peut voir facilement que si $\Psi(x, t)$ est une solution de l'équation, $A\Psi(x, t)$ l'est aussi, où A est une constante (complexe). Ce que nous pouvons faire, alors, c'est choisir ce facteur multiplicatif afin de s'assurer que l'équation (1) est satisfaite.

Ce processus est appelé normalisation de la fonction d'onde.

Pour certaines solutions de l'équation de Schrödinger, l'intégrale est infinie ; dans ce cas, aucun facteur multiplicatif ne la ramènera à 1. Il en va de même pour la solution triviale $\Psi = 0$.

De telles solutions non normalisables ne peuvent pas représenter des particules et doivent être rejetées. Les états physiquement réalisables correspondent aux solutions de l'équation de Schrödinger dites de « carré intégrable ».

Normalisation

Ceci dit, Si on suppose que la fonction d'onde est normalisée à l'instant $t = 0$, comment peut-on savoir qu'elle restera normalisée, au fil du temps ? (on ne peut pas continuer à renormaliser la fonction d'onde à chaque instant, car alors A deviendra une fonction de t , et $A(t)\Psi(x, t)$ ne sera plus une solution de l'équation de Schrödinger).

Heureusement, l'équation de Schrödinger a la propriété de conserver automatiquement la normalisation de la fonction d'onde -- sans cette caractéristique cruciale, l'équation de Schrödinger serait incompatible avec l'interprétation statistique, et toute la théorie quantique s'effondrerait. Nous ferions donc mieux de nous arrêter pour une preuve de ce point :

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (2)$$

Normalisation

On Notera que l'intégrale de gauche est une fonction uniquement de t , donc on utilisera une dérivée totale (d/dt) dans le premier terme, mais l'intégrande de droite est une fonction de x ainsi que de t , donc c'est une dérivée partielle ($\partial/\partial t$) dans le second terme.
Et on a:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi$$

L'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V \Psi$$

Et on aussi, en prenant le complexe conjugué: $\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*$

Normalisation

D'où:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]$$

L'intégrale dans (2) peut maintenant être évaluée explicitement :

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right]_{-\infty}^{\infty}$$

Mais $\Psi(x, t)$ doit tendre vers zéro lorsque x tend vers $\pm\infty$, sinon la fonction d'onde ne serait pas normalisable. Il s'ensuit que: $\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0$.

Donc, l'intégrale de gauche est constante (indépendante du temps); si Ψ est normalisée à $t = 0$, elle reste normalisée pour tout temps futur.

Etats stationnaires

Nous avons parlé de la fonction d'onde et de la façon dont on l'utilise pour calculer diverses quantités d'intérêt.

Ceci dit, il faudra s'affronter à ce qui est, logiquement, une question préalable : Comment procède-t-on déjà pour obtenir $\Psi(x, t)$ - Autrement dit, comment allons-nous procéder pour résoudre l'équation de Schrödinger ?

On supposera dans ce qui suit que le potentiel, V , est indépendant du temps. Dans ce cas, l'équation de Schrödinger peut être résolue par la méthode de séparation des variables (première ligne d'attaque du physicien sur toute équation aux dérivées partielles). On cherchera des solutions qui sont des produits simples de fonctions spatiales et temporelles.

Etats stationnaires

On posera:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)f(t)$$

où ψ est une fonction seulement de x et f est une fonction seulement de t .

À première vue, il s'agit d'une restriction absurde, et nous ne pouvons espérer obtenir qu'un petit sous-ensemble de toutes les solutions possibles de cette manière. Ceci dit, les solutions que nous obtenons s'avèrent être d'un grand intérêt.

De plus, comme c'est typiquement le cas avec la séparation des variables, nous pourrons à la fin assembler les solutions séparables de manière à construire la solution la plus générale.

Etats stationnaires

Pour les solutions séparables, on a:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{df}{dt}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \psi}{dx^2} f$$

En remplaçant dans l'équation de Schrödinger, on a:

$$i\hbar\psi \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} f + V\psi f$$

En divisant par ψf , on a:

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V$$

Etats stationnaires

Le côté gauche est fonction seulement de t , et le côté droit est fonction seulement de x . Pour que l'équation soit vraie, il faut que les deux côtés soient en fait constants - sinon, en faisant varier t , on pourra changer le côté gauche sans toucher au côté droit, et les deux ne seraient plus égaux. Nous appellerons la constante de séparation E . Alors:

$$i\hbar \frac{1}{f} \frac{df}{dt} = E \Rightarrow \frac{df}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} f \quad (3)$$

Et:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad (4)$$

Etats stationnaires

La séparation de variables a transformé une équation différentielle partielle (équation de Schrödinger) en deux équations différentielles ordinaires (équations (3) et (4)). La première d'entre elles est facile à résoudre (il suffit de multiplier par dt et d'intégrer); la solution générale est de la forme $C \exp(-iEt/\hbar)$, mais autant absorber la constante C dans ψ (puisque la quantité d'intérêt est le produit ψf).

Alors:

$$f(t) = \exp(-iEt/\hbar)$$

La seconde équation (4) est appelée équation de Schrödinger indépendante du temps. Pour résoudre cette équation, il faudra déjà spécifier le potentiel $V(x)$ (nous y reviendrons plus tard dans ce cours).

Etats stationnaires

Répondons maintenant à la question: où réside l'intérêt des solutions séparables ? Après, comme précisé auparavant, la plupart des solutions de l'équation de Schrödinger (dépendante du temps) ne prennent pas la forme $\psi(x)f(t)$. Nous proposerons trois réponses, dont deux physiques et une mathématique :

1. Ce sont des états stationnaires. Bien que la fonction d'onde elle-même,

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$$

dépend (évidemment) de t , la densité de probabilité:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi = \psi^* \exp(iEt/\hbar) \psi \exp(-iEt/\hbar) = |\psi(x)|^2$$

ne l'est pas. La dépendance temporelle s'annule.

Etats stationnaires

Le même se produit pour le calcul de la valeur moyenne de toute variable dynamique:

$$\langle Q(x, p) \rangle = \int \Psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx = \int \psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi dx$$

La valeur moyenne est constante dans le temps.

Nous pourrions tout aussi bien laisser tomber le facteur $f(t)$ et simplement utiliser ψ à la place de Ψ (en effet, il est courant de se référer à ψ comme "la fonction d'onde", mais c'est un langage qui peut être dangereux, car il est important de se rappeler que la vraie fonction d'onde porte toujours ce facteur exponentiel dépendant du temps).

Etats stationnaires

2. Ce sont des états à énergie totale définie. En mécanique classique, l'énergie totale (cinétique plus potentielle) est appelée **Hamiltonien** :

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

L'opérateur Hamiltonien correspondant, obtenu par la substitution $p \rightarrow (\hbar/i)(\partial/\partial x)$, est donc:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Ainsi, l'équation de Schrödinger indépendante du temps (équation (4)) peut s'écrire:

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

Etats stationnaires

La valeur moyenne de l'énergie totale est alors:

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E$$

(Il faut noter que la normalisation de Ψ entraîne la normalisation de ψ). De plus,

$$\widehat{H^2}\psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2\psi$$

Et donc:

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \int |\psi|^2 dx = E^2$$

Etats stationnaires

La variance de l'Hamiltonien est alors:

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$$

Mais il faut se rappeler que, statistiquement parlant, si l'écart-type $\sigma = 0$, alors tous les éléments de l'échantillon statistique doivent partager la même valeur (la distribution a une propagation nulle).

Conclusion :

Une solution séparable a la propriété que chaque mesure de l'énergie totale est certaine de renvoyer la valeur E.

Etats stationnaires

3. La solution générale Ψ est une combinaison linéaire de solutions séparables. L'équation de Schrödinger indépendante du temps (équation (4)) donne un ensemble infini de solutions $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$, chacune avec sa valeur associée de constante de séparation – énergie (E_1, E_2, E_3, \dots) .

Il existe donc une fonction d'onde différente pour chaque énergie autorisée :

$$\Psi_1(x, t) = \psi_1(x) \exp(-iE_1 t/\hbar), \Psi_2(x, t) = \psi_2(x) \exp(-iE_2 t/\hbar), \dots$$

On pourra alors facilement voir que toute combinaison linéaire de ces solutions est elle-même une solution de l'équation de Schrödinger (dépendante du temps).

Etats stationnaires

Une fois que nous avons trouvé les solutions séparables, alors, nous pouvons immédiatement construire une solution beaucoup plus générale, de la forme:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \exp(-iE_n t/\hbar)$$

Où c_n sont des complexes.

Il se trouve que toute solution de l'équation de Schrödinger (dépendante du temps) peut s'écrire sous cette forme. Il s'agira simplement de trouver les bonnes constantes (c_1, c_2, \dots) afin de répondre à l'objectif initial du problème traité.

Le point principal est le suivant : une fois que nous avons résolu l'équation de Schrödinger indépendante du temps, nous avons pratiquement terminé; aller de là à la solution générale de l'équation de Schrödinger dépendante du temps est simple et direct.

Partie II: Puits quantiques

Objectif global

Cette partie détaille les process physiques et mathématiques de la résolution de l'équation de Schrödinger considérant différents types de potentiels en illustrant les différences physiques engendrées par le choix d'un potentiel par rapport à l'autre.

Sommaire

- Puits de potentiel carré infini
- Oscillateur harmonique
- Particule libre
- Discussion: état lié vs. état de diffusion
- Facultatif: puits de potentiel carré fini

Puits de potentiel carré infini

Comme énoncé dans la première partie de ce cours, la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps passe par la définition du potentiel $V(x)$.

Dans un premier temps, intéressons-nous au potentiel carré infini et supposons la forme suivante:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{si } x \in [0, a] \\ \infty, & \text{si } x \notin [0, a] \end{cases}$$

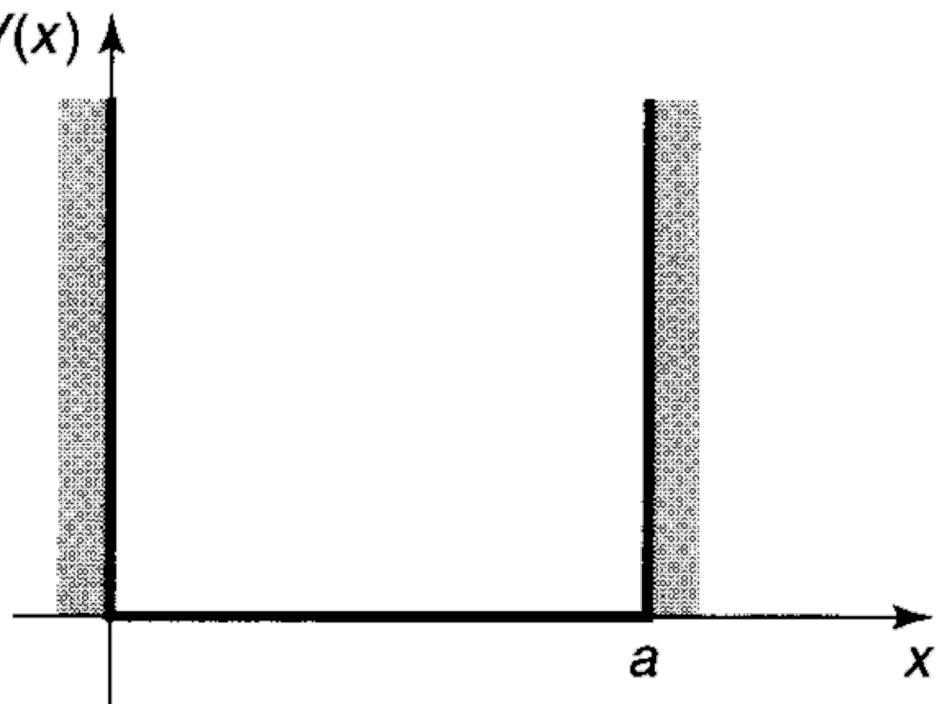


Figure: Puits de potentiel carré infini

Puits de potentiel carré infini

Une particule dans ce potentiel est complètement libre, sauf aux deux extrémités ($x = 0$ et $x = a$), où une force infinie l'empêche de s'échapper.

Ce potentiel est « terriblement » théorique. Ceci dit, malgré sa simplicité, ou plutôt précisément à cause de sa simplicité, c'est un très bon cas de test (benchmark) pour d'autres types de puits de potentiel « plus physiques ».

En dehors du puits: $\psi(x) = 0$ (la probabilité de trouver la particule à l'extérieur est nulle).

À l'intérieur du puits, où $V = 0$, l'équation de Schrödinger indépendante du temps devient:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Puits de potentiel carré infini

L'équation pourra aussi être écrite sous la forme:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

(où on a supposé $E \geq 0$, puisque cette constante à la dimension d'une énergie).

L'équation au-dessus est l'équation (classique) de l'oscillateur harmonique simple. Sa solution générale est:

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

où A et B sont des constantes arbitraires. En général, ces constantes sont fixées par les conditions aux limites du problème.

Puits de potentiel carré infini

Quelles sont les conditions aux limites appropriées pour $\psi(x)$?

Habituellement, $\psi(x)$ est continue. Ceci requiert que:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

Qu'est-ce que cela nous dit sur A et B ?

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = 0$$

Donc $B = 0$ et alors:

$$\psi(x) = A \sin kx$$

Par la suite: $\psi(a) = A \sin ka = 0$, donc soit $A = 0$ (auquel cas nous nous retrouvons avec la solution triviale non normalisable $\psi(x) = 0$), ou bien $\sin ka = 0$, ce qui signifie que: $ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi, \dots$

Puits de potentiel carré infini

Mais le cas $k = 0$ n'est pas bon (encore une fois, cela impliquerait $\psi(x) = 0$). Les solutions négatives n'apportent aussi rien de nouveau, puisque $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$. Nous pouvons donc absorber le signe moins dans la constante A . Les solutions distinctes sont alors:

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Curieusement, la condition aux limites $x = a$ ne détermine pas la constante A , mais plutôt la constante k , et donc les valeurs possibles de E :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

(où nous avons considéré l'énergie totale comme étant la somme de l'énergie cinétique $p^2/2m$ avec $p = \hbar k$, et l'énergie potentielle qui est par définition nulle à l'intérieur du puits, $V = 0$).

Puits de potentiel carré infini

En contraste fort avec le cas classique, une particule quantique dans un puits carré infini ne peut t'avoir n'importe quelle valeur de l'énergie, mais uniquement les valeurs autorisées E_n .

Comment peut-on maintenant déterminer la constante A ? Réponse: On normalisera ψ :

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1 \text{ donc } |A|^2 = \frac{2}{a}$$

Cela ne détermine que l'amplitude de A , mais il est le plus simple de choisir la racine réelle positive: $A = \sqrt{2/a}$ (une phase dans A – de la forme $\exp i\varphi$, avec φ quelconque – ne portera aucune signification physique de toute façon). À l'intérieur du puits, alors, les solutions sont:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

Puits de potentiel carré infini

Comme mentionné auparavant, l'équation de Schrödinger indépendante du temps livre un ensemble infini de solutions, une pour chaque entier n . Les premières d'entre elles sont tracées dans la figure ci-dessous. ψ_1 , qui correspond à la plus basse énergie E_1 , est appelée l'état fondamental. Les autres ψ_n , dont les énergies augmentent proportionnellement à n^2 , sont appelées états excités.

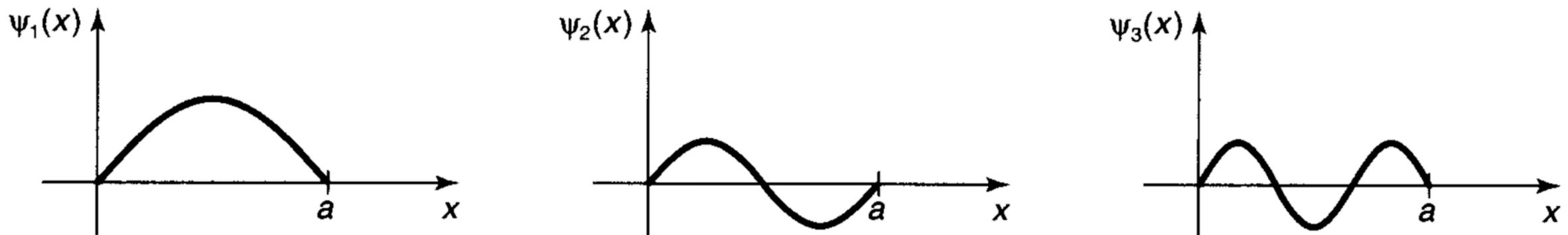


Figure: Les trois premiers états stationnaires du puits de potentiel carré infini

Puits de potentiel carré infini

Propriété: Par un simple calcul et différenciant le cas $n = m$ et $n \neq m$, on voit facilement que les $\psi_n(x)$ sont orthonormées:

$$\int \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

(Bien sûr, ici, $\psi_m^*(x) = \psi_m(x)$, car les fonctions d'onde sont réelles).

Les états stationnaires (définis dans la première partie du cours comme $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iEt/\hbar)$) s'écriront maintenant dans le cas du puits de potentiel carré infini sous la forme:

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \exp\left(-i\left(n^2\pi^2\hbar/2ma^2\right)t\right)$$

Puits de potentiel carré infini

La solution la plus générale de l'équation de Schrödinger (dépendante du temps) est une combinaison linéaire des états stationnaires définis:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \exp\left(-i\left(n^2\pi^2\hbar/2ma^2\right)t\right)$$

Si nous calculons les coefficients de développement c_n , on pourra les insérer dans l'équation au-dessus pour obtenir $\Psi(x, t)$.

Une fois la fonction d'onde obtenue, nous serons en mesure de calculer toute grandeur dynamique d'intérêt.

A noter que ce même « algorithme » s'applique à tout potentiel - les seules changements résideront dans la forme fonctionnelle des ψ et l'équation des énergies autorisées.

Oscillateur harmonique

Le paradigme d'un oscillateur harmonique classique est une masse m attachée à un ressort de constante de force k . Le mouvement est régi par la loi de Hooke:

$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

La solution de cette équation est:

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t)$$

Où $\omega = \sqrt{k/m}$ est la fréquence (angulaire) de l'oscillation.

L'énergie potentielle est défini dans ce cas comme étant:

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

Et son graphe est une parabole.

Oscillateur harmonique

Bien sûr, il n'existe pas d'oscillateur harmonique simple parfait – si on l'étire trop loin, le ressort cassera, et généralement la loi de Hooke échoue bien avant que ce point ne soit atteint. Mais pratiquement tout potentiel « physique » est approximativement parabolique, au voisinage d'un minimum local (figure).

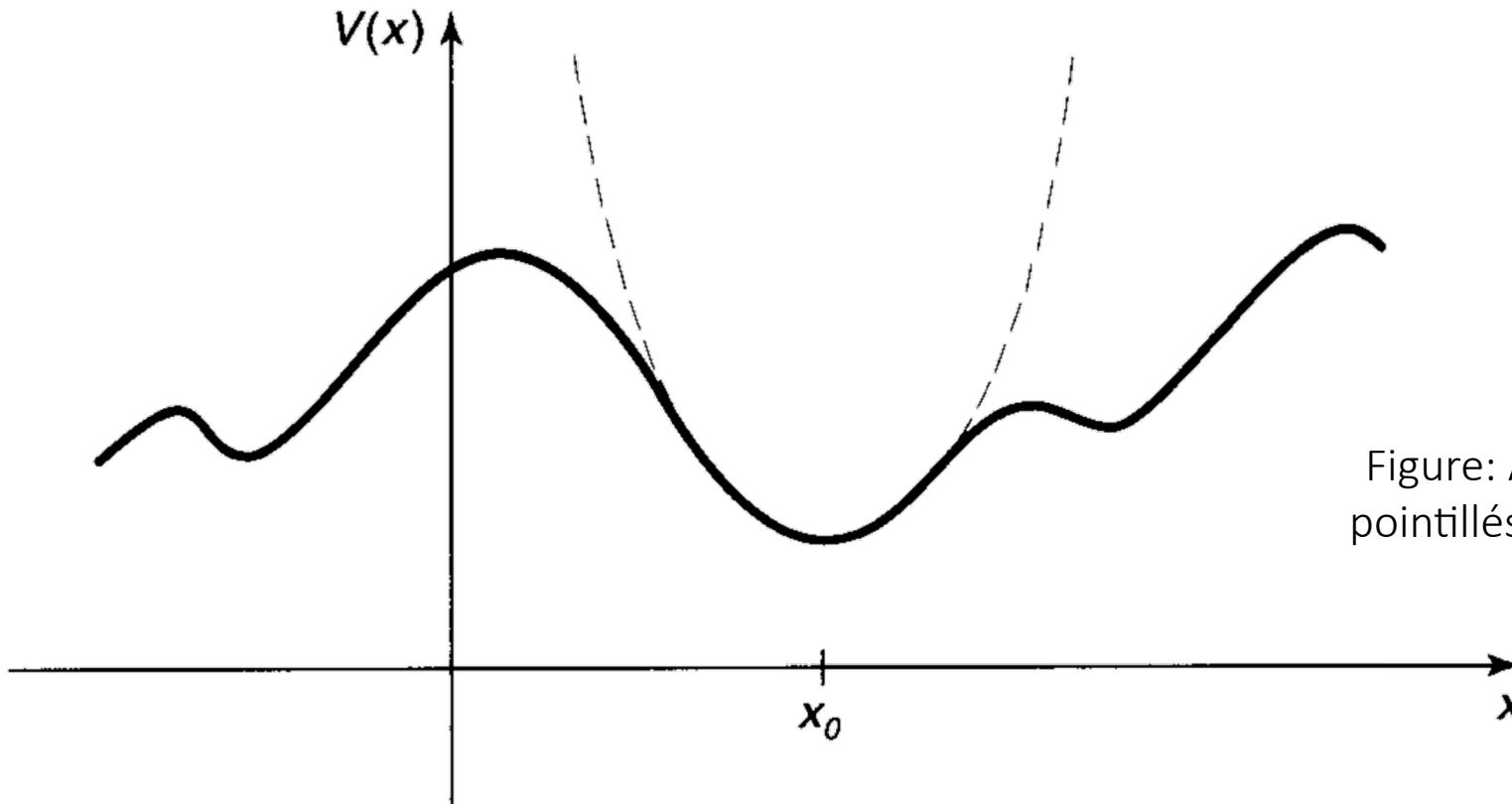


Figure: Approximation parabolique (courbe en pointillés) d'un potentiel arbitraire, au voisinage d'un minimum local.

Oscillateur harmonique

Si nous développons $V(x)$ en une série de Taylor autour du minimum x_0 :

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots$$

En soustrayant $V(x_0)$ (par ajout d'une constante $-V(x_0)$ à $V(x)$, car cela ne changerait pas la force; $F = -\text{grad}_x V$), en reconnaissant que $V'(x_0) = 0$ (puisque x_0 est un minimum) et en laissant tomber les termes d'ordre plus élevé (qui sont négligeables tant que $(x - x_0)$ reste petit), le potentiel devient:

$$V(x) = \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

qui décrit une oscillation harmonique simple (autour du point x_0), avec une constante de raideur effective $k = V''(x_0)$ ($V''(x_0) \geq 0$, puisque x_0 est un minimum). C'est pourquoi l'oscillateur harmonique simple est si important : pratiquement tout mouvement oscillatoire est approximativement harmonique simple, tant que l'amplitude est petite.

Oscillateur harmonique

Le problème quantique consiste à résoudre l'équation de Schrödinger pour le potentiel:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Où on a remplacé la constante de raideur par la fréquence d'oscillation selon $\omega = \sqrt{k/m}$. Comme nous l'avons vu auparavant, il suffira maintenant de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

Il existe dans la littérature deux méthodes pour résoudre l'équation au-dessus: une analytique et l'autre algébrique. On adoptera, dans le cadre de ce cours, la résolution algébrique qui exploite les propriétés des opérateurs d'échelle (qu'on définira brièvement).

Oscillateur harmonique

Pour commencer, réécrivons l'équation précédente sous cette forme:

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] \psi = E\psi \quad (5)$$

L'idée est de factoriser les termes entre crochets. S'il s'agissait de scalaire, ce serait facile :

$$u^2 + v^2 = (u - iv)(u + iv)$$

Ici, cependant, ce n'est pas aussi simple, car les termes de l'équation que représentent u et v sont des opérateurs, et les opérateurs ne commutent pas en général (uv n'est pas la même chose que vu) – l'indentification d'en haut n'est pas vrai dans ce cas.

Oscillateur harmonique

Pour contourner ce problème, introduisons les opérateurs suivants:

$$a_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \pm im\omega x \right)$$

Et calculons le produit $a_- a_+$. Considérons une fonction test $f(x)$, on a:

$$\begin{aligned}(a_- a_+)f(x) &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) f(x) \\ &= \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - im\omega x \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} + im\omega x f \right) \\ &= \frac{1}{2m} \left[-\hbar^2 \frac{d^2 f}{dx^2} + \hbar m\omega \frac{d}{dx} (xf) - \hbar m\omega x \frac{df}{dx} + (m\omega x)^2 f \right] \\ &= \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 + \hbar m\omega \right] f(x)\end{aligned}$$

Où on a utilisé: $d(xf)/dx = x(df/dx) + f$.

Oscillateur harmonique

En enlevant la fonction test, on conclut que:

$$a_- a_+ = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] + \frac{1}{2} \hbar\omega$$

On remarque que l'équation (5) n'est pas complètement factoriser par $a_- a_+$; il y a un terme $(1/2)\hbar\omega$ de plus. Ceci dit, on peut réécrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps de l'oscillateur harmonique comme:

$$\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi = E\psi$$

Oscillateur harmonique

Remarque:

Il faudra noter que l'ordre des opérateurs a_- et a_+ est important; si on recalcule le produit des opérateurs en considérant a_+a_- , on aura:

$$a_+a_- = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 + (m\omega x)^2 \right] - \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Donc: $a_-a_+ - a_+a_- = \hbar\omega$

Et l'équation de Schrödinger s'écrira dans ce cas:

$$\left(a_+a_- + \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi = E\psi$$

Oscillateur harmonique

Vient maintenant l'étape cruciale : on affirmera que si ψ satisfait l'équation de Schrödinger avec l'énergie E , alors $a_+ \psi$ satisfait l'équation de Schrödinger avec l'énergie $(E + \hbar\omega)$.

Preuve:

$$\begin{aligned} & \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \hbar\omega \right) (a_+ \psi) = \left(a_+ a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar\omega a_+ \right) \psi \\ &= a_+ \left(a_- a_+ + \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi = a_+ \left[\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi + \hbar\omega \psi \right] \\ &= a_+ (E\psi + \hbar\omega\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+ \psi) \end{aligned}$$

Par le même raisonnement, $a_- \psi$ est aussi solution de l'équation avec l'énergie $(E - \hbar\omega)$.
N.B. : le calcul se fera bien sûr dans ce cas en utilisant de la forme de l'équation:

$$\left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \hbar\omega \right) \psi = E\psi$$

Oscillateur harmonique

En résumé, si on arrive à trouver une seule solution initiale, on pourra générer de nouvelles solutions, avec des énergies plus élevées et plus faibles.

Nous appelons a_{\pm} les opérateurs d'échelle, car ils nous permettent de monter et descendre en énergie ; a_+ est appelé l'opérateur de création et a_- l'opérateur d'annihilation. « L'échelle » des états est illustrée sur la figure.

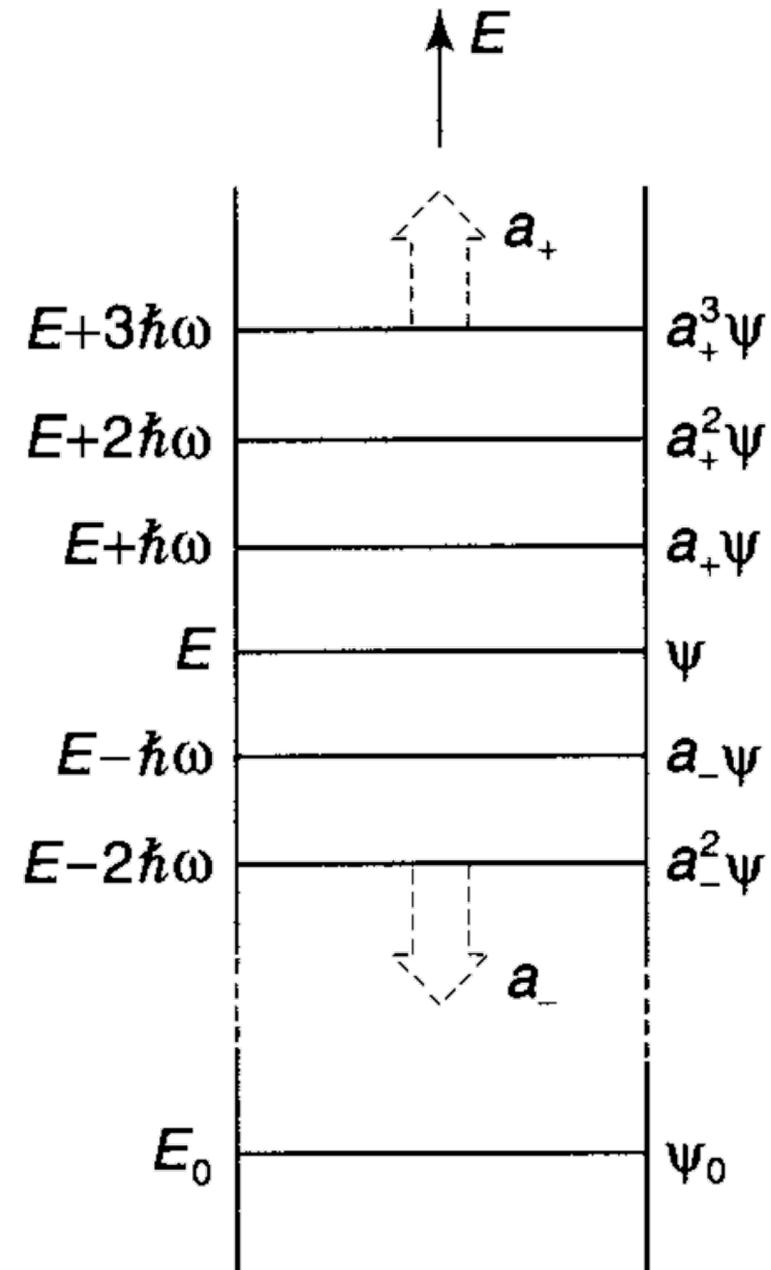


Figure: Echelle des états stationnaires de l'oscillateur harmonique simple

Oscillateur harmonique

Une question logique qui se pose: que se passe-t-il si on applique l'opérateur d'annihilation à plusieurs reprises ?

On atteindra le plus bas état possible (en-dessous duquel il n'y a plus d'état permis). Cet état correspondra bien sûr à la plus petite énergie possible.

Le "plus bas échelon" (appelons-le ψ_0 - correspondant à E_0) doit alors vérifier la condition:

$$a_- \psi_0 = 0$$

En remplaçant a_- par sa forme, on a:

$$\frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi_0}{dx} - im\omega x\psi_0 \right) = 0$$

Donc:

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar} x\psi_0$$

Oscillateur harmonique

Cette équation différentielle pour ψ_0 est facile à résoudre :

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + C$$

Donc,

$$\psi_0(x) = A_0 \exp -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \quad (A_0 \equiv \exp C)$$

Pour déterminer l'énergie de cet état, on l'introduit dans l'équation de Schrödinger (sous la forme $(a_+ a_- + (1/2)\hbar\omega)\psi_0 = E_0\psi_0$), et on exploite le fait que $a_-\psi_0 = 0$. On a donc:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

Oscillateur harmonique

l'échelon inférieur étant maintenant solidement déterminé (et qui représente l'état fondamental de l'oscillateur quantique), nous appliquons simplement l'opérateur de création pour générer les états excités:

$$\psi_n(x) = A_n(a_+)^n \exp -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2, \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

N.B. 1: Il faudra noter que l'échelle des états stationnaires est unique, puisque l'état fondamental est déterminé de manière unique par la condition $a_- \psi_0 = 0$.

N.B. 2: Dans le cas de l'oscillateur harmonique, On numérote, par convention, les états à partir de $n = 0$ au lieu de $n = 1$. Évidemment, Il faudra tenir compte de cette convention dans l'équation (limite inférieure de la somme) de la solution générale $\Psi(x, t)$.

Oscillateur harmonique

Exemple: Calculons ψ_1 :

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_1 a_+ \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) = A_1 \frac{1}{\sqrt{2m}} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} + im\omega x \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \\ &= \frac{A_1}{\sqrt{2m}} \left[\frac{\hbar}{i} \left(-\frac{m\omega}{\hbar} x \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) + im\omega x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \right]\end{aligned}$$

En simplifiant:

$$\psi_1(x) = (iA_1\omega\sqrt{2m})x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

De cette façon, nous pouvons calculer tous les états ψ_n (et toutes les énergies autorisées E_n). Donc, en principe, nous pouvons déterminer les états stationnaires $\Psi_n(x, t)$ et par la suite la solution générale $\Psi(x, t)$.

N.B. : Le facteur A_1 (ou en général A_n) est déterminé par une simple normalisation de ψ_1 (ou en général ψ_n).

Particule libre

Passons maintenant à ce qui aurait dû être le cas le plus simple:
la particule libre ($V(x) = 0$ partout). Ceci dit, comme on le verra, la particule libre est en fait un exemple étonnamment subtile et délicat.

L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

Qu'on pourra écrire aussi:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Particule libre

On remarquera que l'équation à la même forme qu'à l'intérieur du puits carré infini, où le potentiel est également nul.

Cette fois, cependant, on écrira la solution générale sous forme exponentielle (au lieu de sinus et cosinus):

$$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$$

Contrairement au puits carré infini, il n'y a pas de conditions aux limites pour restreindre les valeurs possibles de k (et donc de E). La particule libre peut transporter n'importe quelle énergie (positive). En intégrant par la suite la dépendance temporelle, $\exp(-iEt/\hbar)$, l'état stationnaire s'écritra:

$$\Psi(x, t) = A \exp\left[ik\left(x - \frac{\hbar k}{2m}t\right)\right] + B \exp\left[-ik\left(x + \frac{\hbar k}{2m}t\right)\right]$$

Particule libre

Le premier terme de l'équation représente une onde se déplaçant vers la droite, et le second terme représente une onde (de même énergie) allant vers la gauche.

D'ailleurs, puisque les deux termes ne diffèrent que par le signe de k , autant écrire:

$$\Psi_k(x, t) = A \exp i \left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right)$$

En permettant à k de prendre des valeurs négatives pour représenter le cas des ondes se déplaçant vers la gauche :

$$k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \begin{cases} k > 0 \Rightarrow \text{déplacement vers la droite} \\ k < 0 \Rightarrow \text{déplacement vers la gauche} \end{cases}$$

Particule libre

La vitesse de ces ondes (le coefficient de t sur le coefficient de x) est:

$$v_{\text{quantique}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

D'autre part, la vitesse classique d'une particule libre d'énergie E est donnée par $E = (1/2)m\nu^2$ (purement cinétique, puisque le potentiel $V = 0$), donc:

$$v_{\text{classique}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{quantique}}$$

Ceci montre que la fonction d'onde (et donc l'onde) de la mécanique quantique se déplace à la moitié de la vitesse de la particule qu'elle est censée représenter! Nous reviendrons sur ce paradoxe sous peu.

Particule libre

Il y a un problème encore plus sérieux auquel nous devons d'abord faire face : la fonction d'onde que nous venons d'obtenir n'est pas normalisable!

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} 1 dx = |A|^2(\infty)$$

Dans le cas de la particule libre, les solutions séparables ne représentent donc pas des états physiquement réalisables. Une particule libre ne peut pas exister dans un état stationnaire, ou pour le dire autrement, il n'existe pas de particule libre avec une énergie définie (autorisée).

On notera cependant que cela ne signifie pas que les solutions séparables ne sont d'aucune utilité. Elles jouent un rôle mathématique totalement indépendant de leur interprétation physique:

Particule libre

La solution générale de l'équation de Schrödinger dépendante du temps est toujours une combinaison linéaire de solutions séparables (seulement cette fois c'est une intégrale sur la variable continue k , au lieu d'une somme sur l'indice discret n):

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) \exp \left[i \left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right) \right] dk$$

La quantité $1/\sqrt{2\pi}$ est factorisée pour plus de commodité; ce qui joue le rôle de l'équivalent du coefficient c_n dans le cas discret (du puits infini par exemple) est la combinaison $(1/\sqrt{2\pi}) \phi(k) dk$.

Maintenant, cette fonction d'onde peut être normalisée (pour un $\phi(k)$ approprié). Mais elle balaye nécessairement plusieurs valeurs de k , et donc plusieurs énergies. Nous appelons cela un **paquet d'ondes**.

Particule libre

Généralement, pour un problème quantique, $\Psi(x, 0)$ est donnée, et on doit trouver $\Psi(x, t)$. Pour une particule libre, la forme de la solution $\Psi(x, t)$ étant maintenant connue, la seule question restante est de savoir comment déterminer $\phi(k)$ de manière à ajuster la fonction d'onde initiale :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) \exp(ikx) dk$$

Cela revient à un problème classique d'analyse de Fourier:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) \exp(ikx) dk \Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \exp(-ikx) dx$$

Particule libre

$F(k)$ est la transformée de Fourier de $f(x)$. $f(x)$ est la transformée de Fourier inverse de $F(k)$. Il y a, bien sûr, certaines restrictions sur les fonctions autorisées: les intégrales doivent exister.

Remarque: La condition nécessaire et suffisante sur $f(x)$ est que: $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$.
Dans ce cas : $\int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dk < \infty$, et en fait les deux intégrales sont égales.

Pour notre cas, cela est garanti par l'exigence physique que $\Psi(x, 0)$ doit être normalisée.
Ainsi, la solution au problème quantique, pour la particule libre, est $\Psi(x, t)$, avec:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) \exp(-ikx) dx$$

Particule libre

Revenons maintenant au paradoxe noté auparavant - le fait que la solution séparable $\Psi_k(x, t)$ se déplace à la "mauvaise" vitesse pour la particule qu'elle représente.

À proprement parler, le problème a été déjà résolu lorsque nous avons découvert que Ψ_k n'est pas un état physiquement réalisable. Néanmoins, il est intéressant de découvrir comment les informations sur la vitesse des particules sont transportées par la fonction d'onde $\Psi(x, t)$.

L'idée est la suivante: un paquet d'ondes est une fonction sinusoïdale dont l'amplitude est modulée par ϕ (figure). Le paquet d'ondes consiste en des "ondulations" contenues dans une "enveloppe". Ce qui correspond à la vitesse des particules n'est pas la vitesse des ondulations individuelles (appelée vitesse de phase), mais plutôt la vitesse de l'enveloppe (vitesse de groupe).

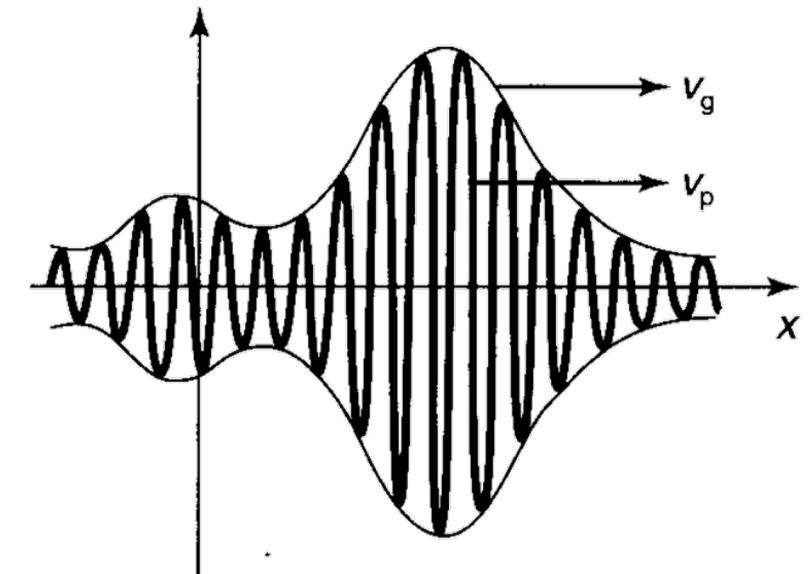


Figure: Un paquet d'ondes. L'"enveloppe" se déplace à la vitesse de groupe, les "ondulations" se déplacent à la vitesse de phase.

Particule libre

Selon la nature des ondes, la vitesse de groupe peut être supérieure à, inférieure à ou égale à la vitesse des ondulations qui composent l'enveloppe.

Illustration: Pour des vagues sur une corde, la vitesse de groupe est la même que la vitesse de phase. Pour des vagues d'eau, la vitesse de groupe est la moitié de la vitesse de phase, comme on peut le remarquer si on jette une pierre dans l'eau : en se concentrant sur une ondulation particulière, on peut la voir se former à l'arrière, avancer dans le groupe pour disparaître à l'avant, tandis que le groupe dans son ensemble se propage à la moitié de la vitesse de cette ondulation.

Pour la fonction d'onde d'une particule libre en mécanique quantique, la vitesse de groupe (représentant la particule qui est équivalente au paquet d'ondes et est représentée par $\Psi(x, t)$) est le double de la vitesse de phase (représentant une onde individuelle qui est représentée par un $\Psi_k(x, t)$ - pour un k donné).

Discussion: état lié vs. état de diffusion

Nous avons rencontré deux types très différents de solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

Pour le puits carré infini et l'oscillateur harmonique, elles sont normalisables et indexées par un indice discret n . Pour la particule libre, elles sont non normalisables et indexées par une variable continue k . Les premières représentent des états physiquement réalisables, les secondes non. Ceci dit, dans les deux cas la solution générale de l'équation de Schrödinger dépendante du temps est une combinaison linéaire d'états stationnaires.

Pour le premier type cette combinaison prend la forme d'une somme (sur n), alors que pour le second c'est une intégrale (sur k).

Quelle est la signification physique de cette distinction ?

Discussion: état lié vs. état de diffusion

En mécanique classique, un potentiel unidimensionnel indépendant du temps peut donner lieu à deux types de mouvement assez différents.

Si $V(x)$ monte plus haut que l'énergie totale de la particule E de chaque côté (figure), alors la particule est "coincée" dans le puits de potentiel -- elle bascule en avant et en arrière entre les points tournants, mais il ne peut pas s'échapper (à moins que bien sûr, qu'on lui fournit une source d'énergie supplémentaire). Nous appelons cela un état lié.

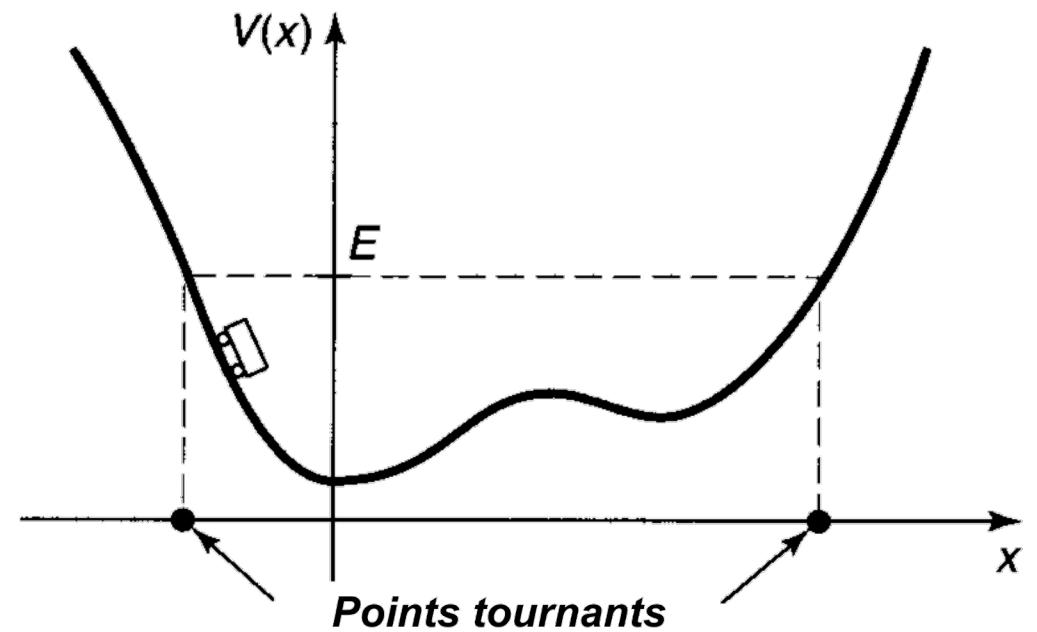


Figure: Etat lié

Discussion: état lié vs. état de diffusion

Si, au contraire, E dépasse $V(x)$ d'un côté (ou des deux), alors la particule arrive de "l'infini", ralentit ou accélère sous l'influence du potentiel, et revient à l'infini (figure). (Il ne peut pas être piégé dans le potentiel à moins qu'il n'y ait un mécanisme, tel que le frottement, pour dissiper l'énergie). Nous appelons cela un état de diffusion.

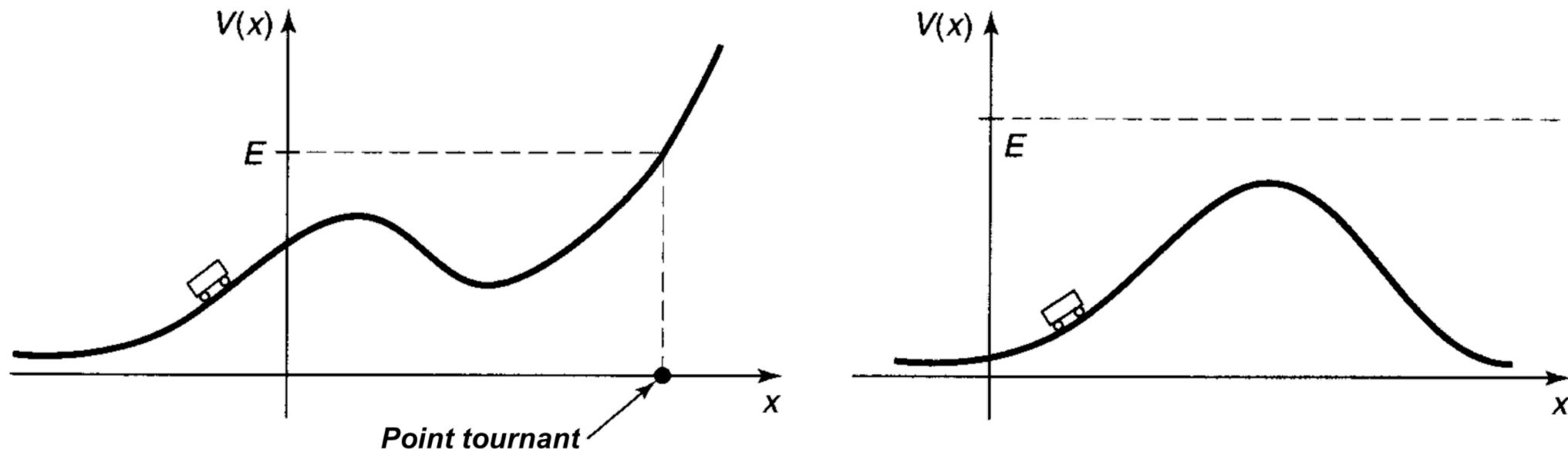


Figure: Etats de diffusion

Discussion: état lié vs. état de diffusion

Certains potentiels n'admettent que des états liés, certains n'autorisent que des états de diffusion, alors que d'autres autorisent les deux types d'état, en fonction de l'énergie de la particule.

Comme les potentiels du puits carré infini et de l'oscillateur harmonique tendent vers l'infini lorsque $x \rightarrow \pm\infty$, l'énergie totale d'une particule dans ces configurations sera au-dessous du potentiel des deux côtés ($E < V(-\infty)$ et $V(+\infty)$). Donc, ils n'admettent que des états liés. De l'autre côté, puisque le potentiel de la particule libre est nul partout, l'énergie totale de la particule sera toujours au-dessus du potentiel ($E > 0 = V(x), \forall x \in]-\infty, +\infty[$). Cette configuration ne permet que des états de diffusion.

Comme on peut le deviner maintenant, les deux types de solutions de l'équation de Schrödinger, pour le puit infini et l'oscillateur harmonique et pour la particule libre, correspondent précisément à des états liés et des états de diffusion.

Partie facultative: Puits de potentiel carré fini

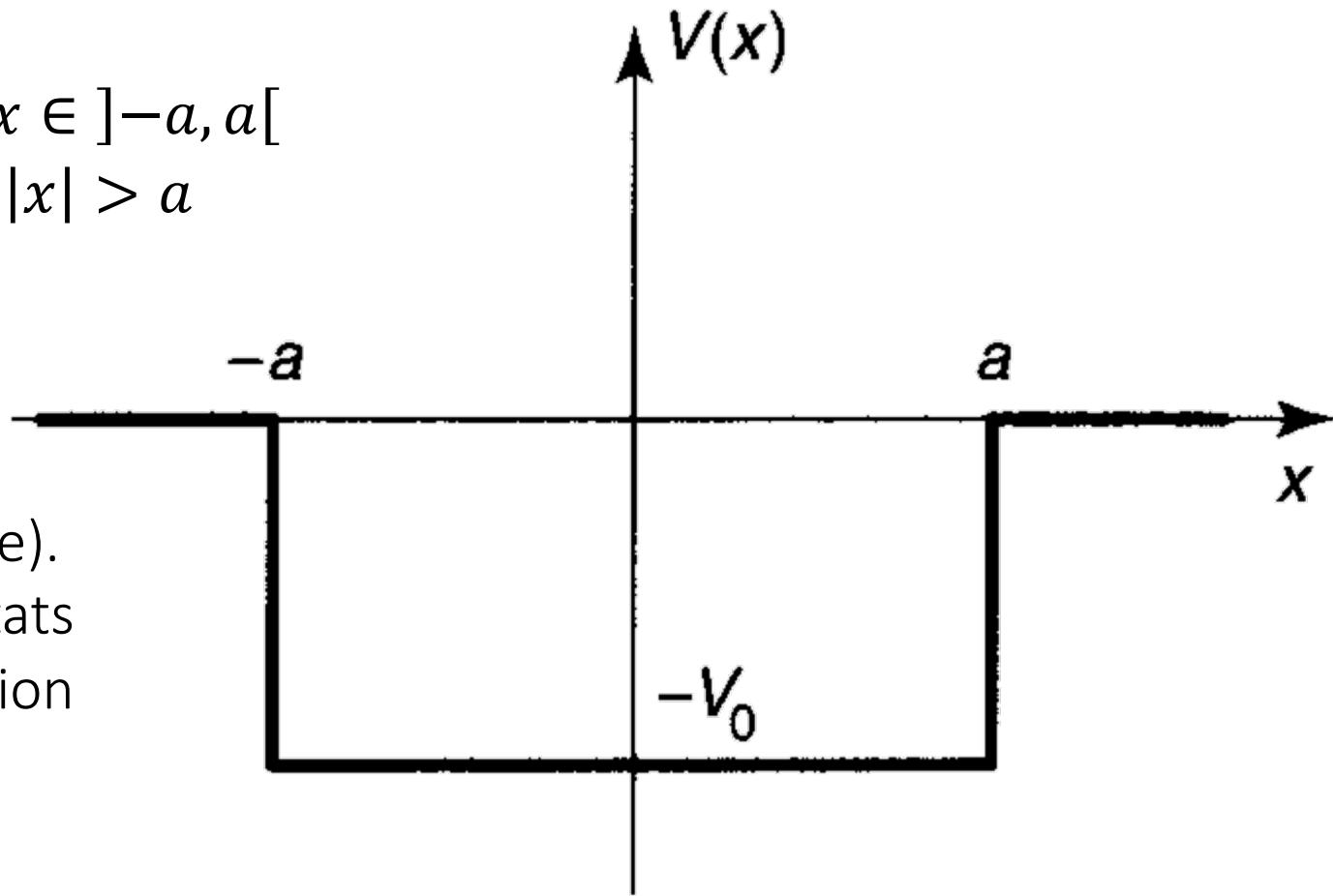
Cette partie sur le puits carré fini contient des notions dont la compréhension demande un travail en autonomie supplémentaire.

Elle est intégrée dans ce support pour l'intéressé à approfondir sa compréhension des puits carrés, mais cela reste à titre facultatif et sort du cadre du cours.

Puits de potentiel carré fini

Considérons maintenant la forme du puits de potentiel carré fini:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0, & \text{si } x \in]-a, a[\\ 0, & \text{si } |x| > a \end{cases}$$



où V_0 est une constante (positive) (figure).

Le puits carré fini admet à la fois des états liés (avec $E < 0$) et des états de diffusion (avec $E > 0$).

Figure: puits carré fini

Puits de potentiel carré fini

Ce qui nous intéressera dans le traitement qui suit sont plutôt les états liés.

Dans la région $x < -a$, le potentiel est nul, donc l'équation de Schrödinger se lit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi$$

Où:

$$\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

est réel et positif. La solution générale est $\psi(x) = A \exp(-\kappa x) + B \exp(\kappa x)$, mais le premier terme diverge (lorsque $x \rightarrow -\infty$), donc la solution « physiquement » admissible est (on doit choisir $A = 0$):

$$\psi(x) = B \exp(\kappa x) \text{ (pour } x < -a\text{)}$$

Puits de potentiel carré fini

Dans la région $-a < x < a$, $V(x) = -V_0$, et l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = -l^2\psi$$

Avec:

$$l = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$$

Bien que E est négative, pour un état lié, elle est supérieure à $-V_0$; donc l est aussi réel et positif. La solution générale est:

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \text{ (pour } -a < x < a)$$

Où C et D sont des constantes arbitraires.

Puits de potentiel carré fini

Finalement, comme pour le cas $x < -a$, dans la région $x > a$, le potentiel est aussi nul et l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} = \kappa^2\psi$$

Où on a posé aussi:

$$\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$$

qui est réel et positif (puisque $E < 0$). La solution générale est:

$$\psi(x) = F \exp(-\kappa x) + G \exp(\kappa x)$$

mais, dans ce cas, le second terme diverge (lorsque $x \rightarrow \infty$), est il nous reste:

$$\psi(x) = F \exp(-\kappa x) \text{ (pour } x > a\text{)}$$

Puits de potentiel carré fini

L'étape suivante consiste à imposer des conditions aux limites : ψ et $d\psi/dx$ sont continues en $-a$ et a .

En notant que le potentiel est une fonction paire, on peut supposer que, généralement, les solutions sont paires ou impaires, c-à-d $\psi(-x) = \pm \psi(x)$. L'avantage est que nous n'avons besoin d'imposer les conditions aux limites que d'un côté (disons, en $+a$) ; l'autre côté est alors déterminé automatiquement.

On s'intéressera dans cette partie aux solutions paires (les solutions impaires suivent le même raisonnement de toute façon). Le cosinus étant pair et le sinus impair, on cherche alors les solutions de la forme:

$$\psi(x) = \begin{cases} F \exp(-\kappa x), & x > a \\ D \cos(lx), & 0 < x < a \\ \psi(-x), & x < 0 \end{cases}$$

Puits de potentiel carré fini

La continuité de $\psi(x)$, à $x = a$, donne:

$$F \exp(-\kappa a) = D \cos(la)$$

Et la continuité de $d\psi/dx$, donne:

$$-\kappa F \exp(-\kappa a) = -lD \sin(la)$$

En divisant la deuxième équation par la première, on a:

$$\kappa = l \tan(la)$$

L'équation au-dessus détermine les énergies autorisées puisque κ et l sont fonctions de E .

Pour résoudre cette équation, on adoptera la notation suivante:

$$z = la, \quad z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$$

Puits de potentiel carré fini

En utilisant $\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar$ et $l = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$, on remarque facilement que:

$$\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$$

Donc, l'équation $\kappa = l \tan(la)$ devient:

$$\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$$

Il s'agit d'une équation transcendante de z (et donc de E) en fonction de z_0 (qui est une mesure de la "taille" du puits, de par sa dépendance de a).
elle peut être résolue numériquement ou graphiquement, en traçant $\tan z$ et $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ sur le même graphe, et en cherchant les points d'intersection (voir figure ci-après).

Puits de potentiel carré fini

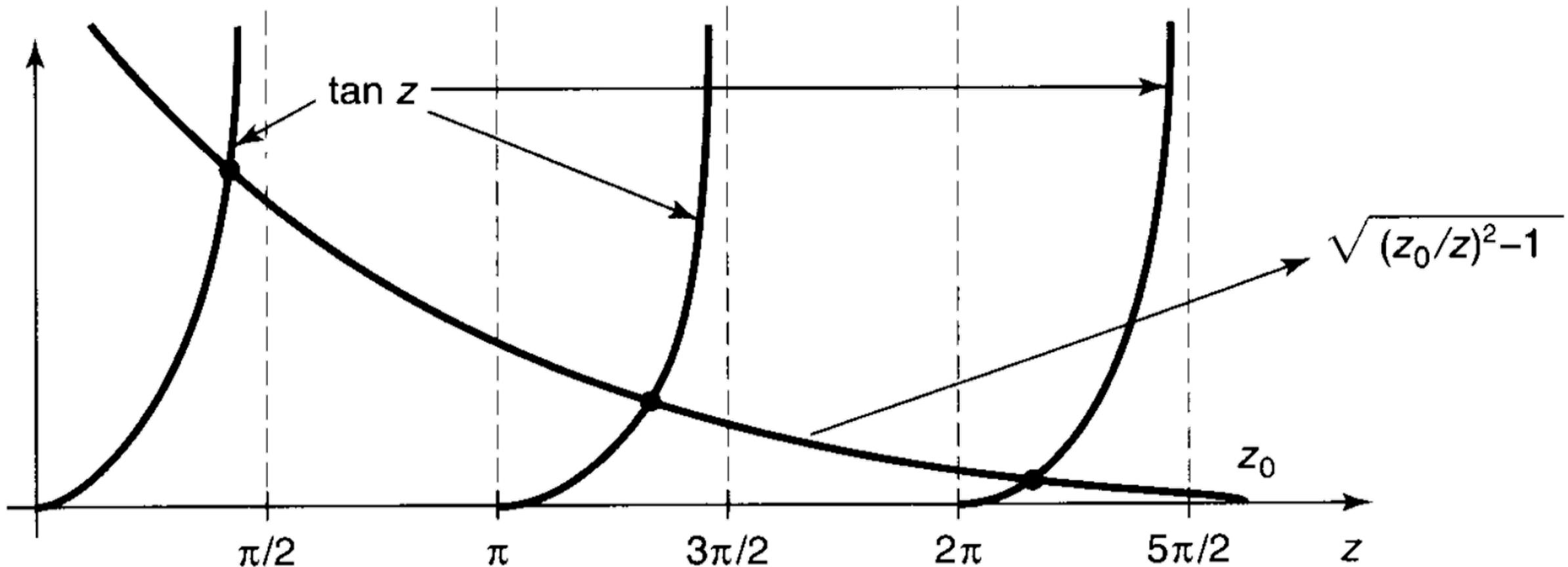


Figure: Solution graphique de l'équation $\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ pour z_0 donné

Puits de potentiel carré fini

Les points d'intersection donneront les z_n solutions de l'équation $\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$, qui à leur tour donneront les E_n énergies des états liés autorisés (Rappelons que le traitement fait jusqu'à maintenant concerne les états liés pour lesquels $E < 0$).

Remarque:

Un cas limite est d'un intérêt particulier: puits large et profond. Si z_0 est très grand, les intersections se produisent juste un peu en-dessous de $z_n = n\pi/2$, avec n impair ; il s'ensuit que:

$$E_n + V_0 \cong \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2}$$

Nous retrouvons à droite de l'équation les énergies du puits de potentiel infini, pour un puits de largeur $2a$ (voir partie puits infini). Ainsi, le puits carré fini convergera dans ce cas vers le puits carré infini, lorsque $V_0 \rightarrow \infty$.

Puits de potentiel carré fini

Passons maintenant au traitement des états de diffusion ($E > 0$).

- À gauche, où $V(x) = 0$, on a:

$$\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx), (x < -a)$$

Où (comme d'habitude): $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

- À l'intérieur du puits, où $V(x) = V_0$, on a:

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), (-a < x < a)$$

Où, comme auparavant: $l = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$

- À droite, en supposant qu'il n'y a pas d'onde entrante dans cette région (portée par $\exp(-ikx)$), on a:

$$\psi(x) = F \exp(ikx)$$

Remarque: Puisqu'on raisonne en terme de diffusion, à l'extérieur du puits, A est l'amplitude incidente, B est l'amplitude réfléchie et F est l'amplitude transmise.

Puits de potentiel carré fini

Il existe quatre conditions aux limites :

1. Continuité de $\psi(x)$ au point $-a$ donne:

$$A \exp(-ika) + B \exp(ika) = -C \sin(la) + D \cos(la)$$

2. Continuité de $d\psi/dx$ au point $-a$ donne:

$$ik[A \exp(-ika) - B \exp(ika)] = l[C \cos(la) + D \sin(la)]$$

3. Continuité de $\psi(x)$ au point $+a$ donne:

$$C \sin(la) + D \cos(la) = F \exp(ika)$$

4. Continuité de $d\psi/dx$ au point $+a$ donne:

$$l[C \cos(la) - D \sin(la)] = ikF \exp(ika)$$

Puits de potentiel carré fini

En combinant les équations de continuité, on peut arriver aux identifications suivantes:

$$B = i \frac{\sin(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) F$$

$$F = \frac{\exp(-2ika)A}{\cos(2la) - i \frac{\sin(2la)}{2kl} (k^2 + l^2)}$$

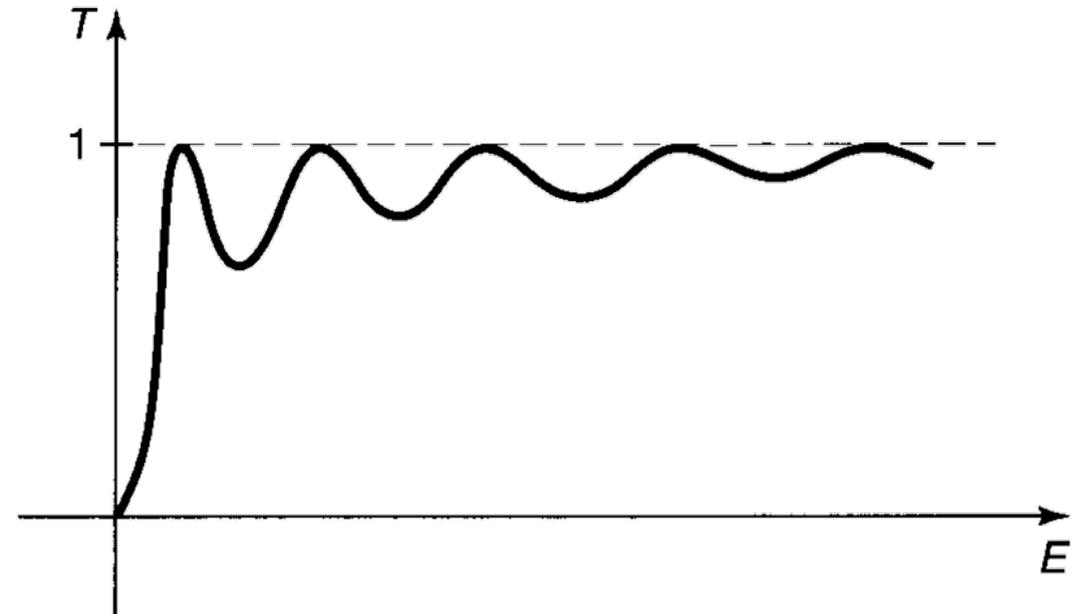


Figure: Coefficient de transmission en fonction de l'énergie

On définira le coefficient de transmission $T = |F|^2 / |A|^2$ (figure).

Exprimé en fonction des variables d'origine, T est donc donné par:

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right)$$

Puits de potentiel carré fini

On peut remarquer que $T = 1$ (le puits devient "transparent") lorsque que la fonction sinus est nulle, c'est-à-dire pour:

$$\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi$$

Où n est un entier. Les énergies pour une transmission parfaite sont donc données par:

$$E_n + V_0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2}$$

qui se trouvent être précisément les énergies autorisées pour le puits carré infini.



Physique quantique

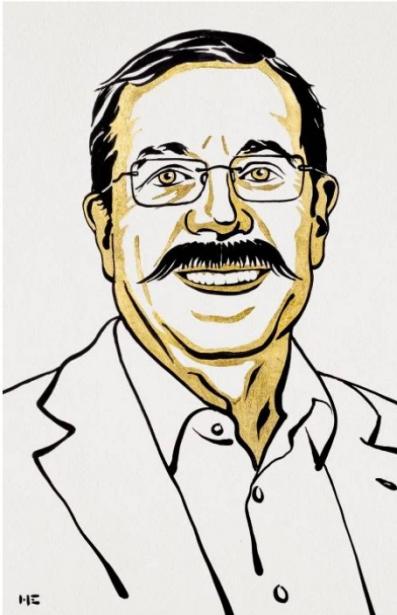
A. Belhboub

anouar.belhboub@centrale-casablanca.ma

Année universitaire 2023/2024

The Nobel Prize in Physics 2022

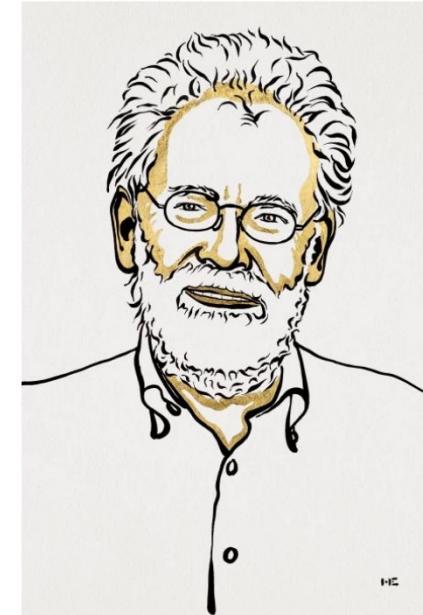
Quantum physics in a nutshell !



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Alain Aspect
Prize share: 1/3



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
John F. Clauser
Prize share: 1/3



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Anton Zeilinger
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Physics 2022 was awarded to Alain Aspect, John F. Clauser and Anton Zeilinger "for experiments with entangled photons, establishing the violation of Bell inequalities and pioneering quantum information science"

The Nobel Prize in Physics 2023

Quantum physics
in a nutshell !



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Pierre Agostini
Prize share: 1/3



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Ferenc Krausz
Prize share: 1/3



III. Niklas Elmehed © Nobel Prize Outreach
Anne L'Huillier
Prize share: 1/3

The Nobel Prize in Physics 2023 was awarded to Pierre Agostini, Ferenc Krausz and Anne L'Huillier "for experimental methods that generate attosecond pulses of light for the study of electron dynamics in matter"

Références

- « Mécanique quantique » Tome 1, Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Frank Laloë, Savoires actuels, EDP Sciences/CNRS Editions
- « Introduction to quantum mechanics », David J. Griffiths, Reed College, Prentice Hall
- « Mathematical topics between classical and quantum mechanics », N. P. Landsman, Springer Science
- « Elements of classical and quantum physics », M. Cini, Springer

Partie I: Passage du classique

au quantique

Objectif global

Cette partie s'inscrit dans une logique de démonstration de la nécessité de la physique quantique pour décrire les phénomènes physiques à l'échelle microscopique en illustrant les fondements expérimentaux démontrant les limites de la mécanique classique

Sommaire

- Besoin d'une théorie quantique
- Dualité onde-corpuscule
- Effet photoélectrique
- Effet Compton
- Phénomène d'interférences
- Spectres atomiques et hypothèses de Bohr

Besoin d'une théorie quantique

Dans la seconde moitié du XIXe siècle, il semblait que les lois de la mécanique classique, développées par le génie de Newton, Lagrange, Hamilton, Jacobi et Poincaré, la théorie de Maxwell des phénomènes électromagnétiques et les lois de la mécanique statistique classique pouvaient prendre compte de tout les phénomènes physiques connus. Pourtant, il est devenu progressivement clair, après plusieurs décennies de travaux expérimentaux et théoriques, qu'il faut formuler un nouveau type de physique, qui se ramène à la physique classique dans une limite convenable, mais permet d'obtenir une description cohérente des phénomènes qui ne peuvent être compris dans le cadre classique.

Besoin d'une théorie quantique

- Comment tenir compte de la stabilité des atomes et des molécules ?
Exemple: si un système atomique, initialement dans un état d'équilibre, est perturbé pendant une courte période, il commence à osciller, et ces oscillations sont finalement transmises au champ électromagnétique dans son voisinage, de sorte que les fréquences du système peuvent être observées au moyen d'un spectrographe.
- Comment décrire le comportement de la lumière ? qui ne peut être expliqué qu'en utilisant une théorie ondulatoire. Cette propriété est « duale » à une image de type particule, et qui est plutôt essentielle pour comprendre par exemple l'émission d'électrons par des surfaces métalliques touchées par un rayonnement électromagnétique ou la diffusion de la lumière par des électrons libres.
- Comment expliquer? l'exploit non trivial d'Einstein pour montrer que l'énergie d'un champ électromagnétique est constituée de quantités élémentaires $W = h\nu$, et que tout se passe comme si ces quantités d'énergie étaient localisées dans l'espace, alors que la physique classique considère que le spectre d'énergie est continu.

Dualité onde-corpuscule

L'effet photoélectrique, l'effet Compton et les phénomènes d'interférences fournissent des preuves expérimentales claires de l'existence du caractère « corpusculaire » et « ondulatoire » des photons. Ceci exige l'utilisation de ces deux « attributs » pour la description de la lumière. Nous avons donc besoin d'une relation entre les concepts d'onde et les concepts corpusculaires. Ceci est fourni pour les photons par l'identification d'Einstein:

$$(\vec{k} \cdot d\vec{x} - \omega dt) = \frac{1}{\hbar} (\vec{p} \cdot d\vec{x} - p_0 dx_0)$$

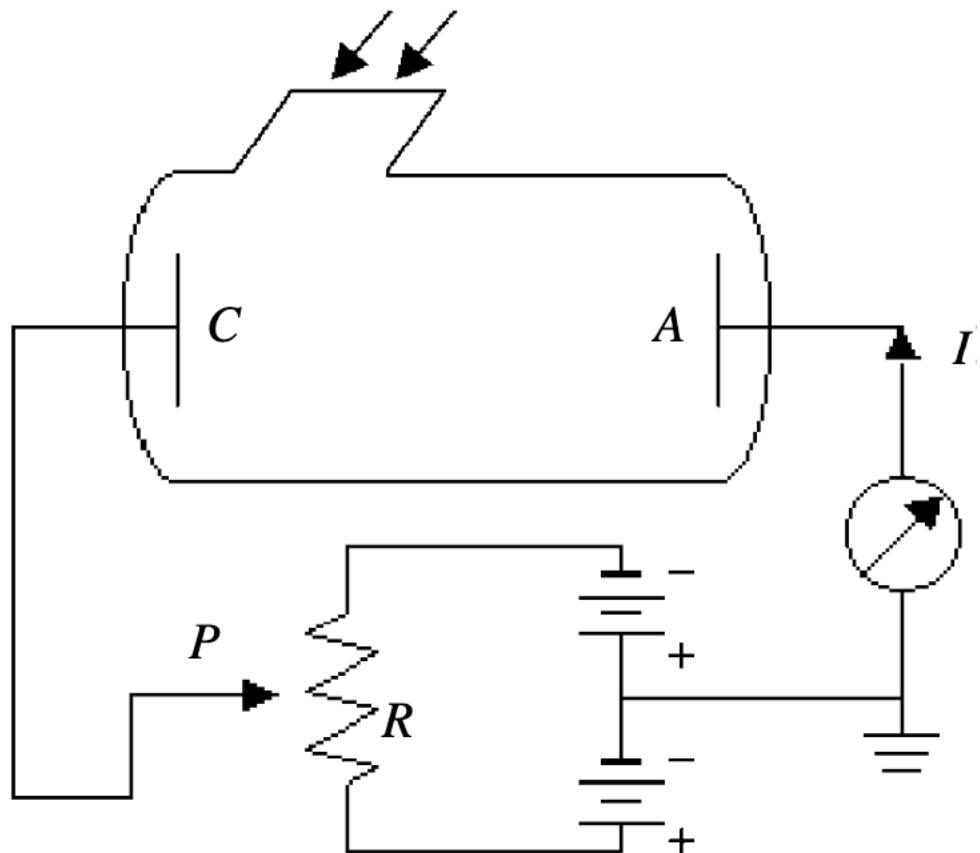
Plus précisément, la lumière a un caractère corpusculaire qui se manifeste grâce aux effets photoélectrique et Compton, mais aussi un caractère ondulatoire comme le montrent les expériences d'interférences. Bien que les photons soient sans masse, on peut leur associer une impulsion linéaire $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, et leur énergie vaut $\hbar\omega = h\nu$.

Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique a été découvert par Hertz et Hallwachs en 1887. L'effet consiste en l'émission d'électrons de la surface d'un solide lorsqu'un rayonnement électromagnétique le frappe.

Dans l'analyse du rayonnement du corps noir (travail en autonomie), on a rencontré, pour la première fois, l'hypothèse des quantas : chaque fois que la matière émet ou absorbe un rayonnement, elle le fait en une séquence d'actes élémentaires, dans chacun desquels une quantité d'énergie ε est émise ou absorbée proportionnellement à la fréquence ν du rayonnement : $\varepsilon = h\nu$, où h est la constante universelle dite constante de Planck.

Effet photoélectrique



Circuit de Millikan:

L'énergie avec laquelle l'électron quitte la surface est mesurée par le produit de sa charge par la différence de potentiel contre laquelle il est juste capable de se pousser avant d'être amené au repos ($T = qV$). Millikan a pris le soin de n'utiliser que de la lumière pour laquelle l'électrode éclairée était photoélectriquement sensible, mais pour laquelle les parois environnantes n'étaient pas photosensibles.

Effet photoélectrique

Les trois lois empiriques d'un tel effet sont les suivantes:

- a) Les électrons ne sont émis que si la fréquence du rayonnement entrant est supérieure à une certaine valeur ν_0 , qui est une propriété particulière du métal utilisé dans l'expérience et est appelée le *seuil photoélectrique*.
- b) Les vitesses des électrons émis par la surface vont de 0 à une valeur maximale ν_{max} . L'énergie cinétique correspondant à ν_{max} dépend linéairement de la fréquence ν :
 $T_{max} = k(\nu - \nu_0), k > 0$. T_{max} ne dépend pas de l'intensité du rayonnement incident.
- c) Pour une valeur donnée de la fréquence ν du rayonnement incident, le nombre d'électrons émis par cm^2 par seconde est proportionnel à l'intensité.

Effet photoélectrique

Ces propriétés ne peuvent être comprises si l'on suppose que la théorie classique de l'électromagnétisme régit le phénomène. En particulier, si l'on suppose que l'énergie est uniformément répartie sur la surface métallique, on ne sait pas comment l'émission d'électrons peut se produire lorsque l'intensité du rayonnement est extrêmement faible, ce qui nécessiterait beaucoup de temps avant que l'électron ne reçoive assez d'énergie pour s'échapper du métal (le décalage temporel entre l'incidence du rayonnement sur une surface et l'apparition des (photo)électrons est inférieur à 10^{-9} s).

Cependant, l'émission particulière d'électrons est naturellement expliquée, si on suppose que l'énergie du rayonnement est quantifiée non seulement lorsque l'émission ou l'absorption a eu lieu, mais peut également voyager dans l'espace sous la forme de quantas élémentaires d'énergie $h\nu$.

Effet photoélectrique

Sous ces conditions, l'effet photoélectrique doit être considéré comme un processus de collision entre les quantas de rayonnement incidents et les électrons appartenant aux atomes de la surface métallique. Selon ce schéma quantique, l'atome sur lequel tombe le photon reçoit, d'un coup, l'énergie $h\nu$.

Un électron ne peut être émis que si l'énergie $h\nu$ est supérieure à une énergie d'extraction W_0 :

$$h\nu > W_0$$

La première loi empirique, (a), est donc comprise, pourvu que l'on identifie le seuil photoélectrique avec:

$$\nu_0 = \frac{W_0}{h}$$

Si l'inégalité est vérifiée, l'électron peut quitter la plaque métallique avec une énergie qui, au mieux, est $T = h\nu - W_0$, qui implique que:

$$T_{max} = h(\nu - \nu_0)$$

Ceci est en parfait accord avec la seconde loi empirique (b).

Effet photoélectrique

Remarques:

- En faisant varier l'intensité du rayonnement incident, le nombre de quanta tombant sur la surface dans un intervalle de temps donné change, mais d'après les formules précédentes, il est clair que l'énergie des quantas, et donc des électrons émis, n'est pas affectée par l'intensité.
- Dans le circuit de Millikan, le rayonnement incident tombe sur une cathode métallique propre, et l'autre électrode recueille les électrons qui sont émis avec l'énergie cinétique $T = h\nu - W_0$. Si V_0 est le potentiel pour lequel le courant s'annule, on a:

$$V_0 = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_0}{e}$$

Effet photoélectrique

“the energy of a light ray spreading out from a point source is not continuously distributed over an increasing space but consists of a finite number of energy quanta which are localized at points in space, which move without dividing, and which can only be produced and absorbed as complete units”

- Einstein (1905)

Effet Compton

Classiquement, une onde plane monochromatique de nature électromagnétique est porteuse de quantité de mouvement selon la relation $p = E/c$. Puisque E est quantifié, on peut naturellement se demander si la quantité de mouvement est portée sous forme de quantas de valeur absolue $h\nu/c$. L'effet Compton fournit des preuves expérimentales claires en faveur de cette conclusion.

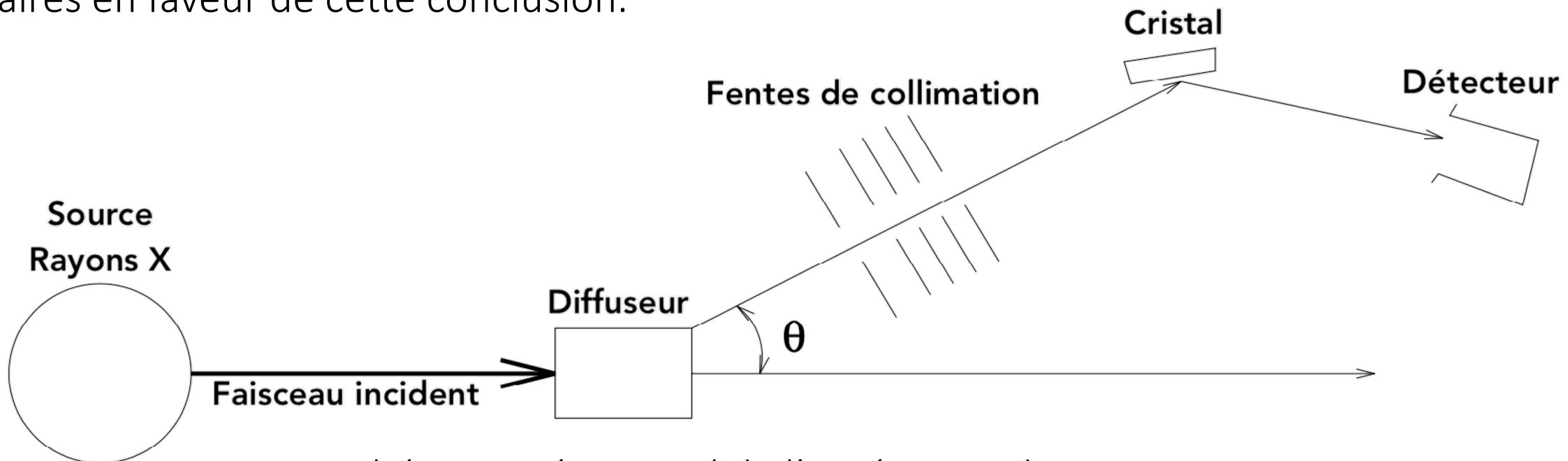
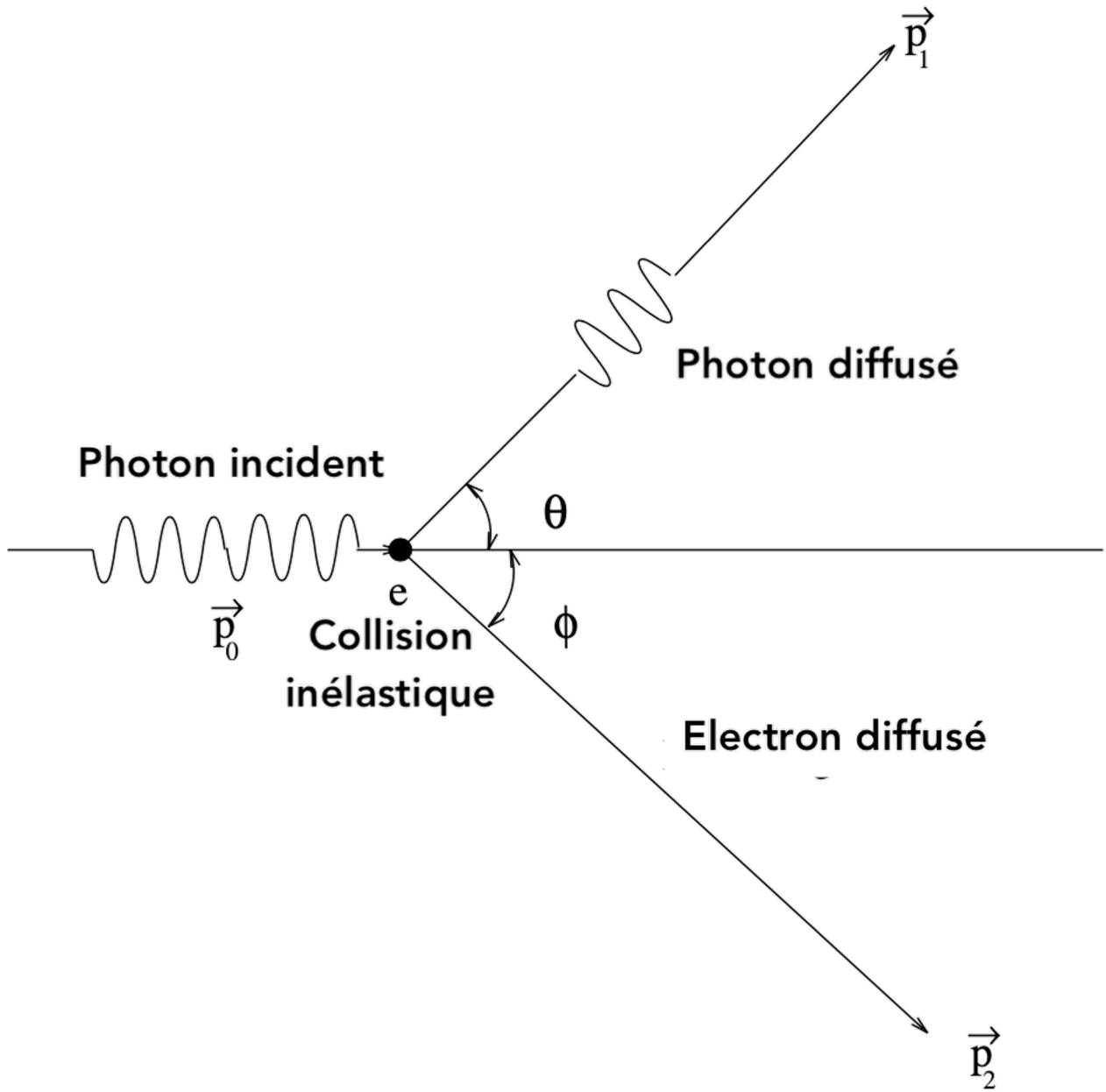


Schéma expérimental de l'expérience de Compton

Effet Compton

L'effet Compton peut être étudié par la diffusion des rayons X et γ monochromatiques dans les gaz, les liquides et les solides. Les phénomènes de diffusion ont lieu par collision entre les photons incidents et les particules chargées (électrons) du milieu.



Effet Compton

Sur le plan expérimental:

Dans des circonstances normales, les rayons X traversent un matériau de faible poids atomique (par exemple: charbon). Un spectrographe en cristal recueille et analyse les rayons diffusés dans une direction donnée. On trouve alors, conjointement avec le rayonnement diffusé au moyen du processus que nous décrivons, un autre rayonnement qui est diffusé sans aucun changement de sa longueur d'onde.

Il existe deux raies voisines : l'une d'elles a la même longueur d'onde λ que le rayonnement incident, tandis que l'autre raie a une longueur d'onde $\lambda' > \lambda$.

Effet Compton

La ligne pour laquelle la longueur d'onde reste inchangée peut être expliquée en pensant que le photon incident rencontre les électrons "plus profonds" du matériau diffusant. Pour de tels processus, la masse de l'atome entier est impliquée, ce qui réduit considérablement la valeur du décalage $\lambda' - \lambda$, de sorte qu'il devient pratiquement inobservable.

La ligne pour laquelle la longueur d'onde change tient compte du processus de diffusion impliquant les électrons « externes » du matériau. Dans ce cas, le décalage s'écrit:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta) \text{ avec } \frac{h}{m_e c} = 0.0024 \text{ nm}$$

N.B.: On admettra la relation au-dessus car sa démonstration se fait dans un contexte relativiste qui sort du cadre de ce cours.

Phénomène d'interférences

Une source S de lumière monochromatique éclaire un écran opaque où deux fines fentes, proches l'une de l'autre, ont été réalisées. En traversant les fentes, la lumière est diffractée. Sur une plaque L située à une distance des fentes, on observe des franges d'interférence dans la zone où se produit le recouvrement des diagrammes de diffraction produits à partir des fentes A et B, c'est-à-dire où la lumière est reçue simultanément de A et B.

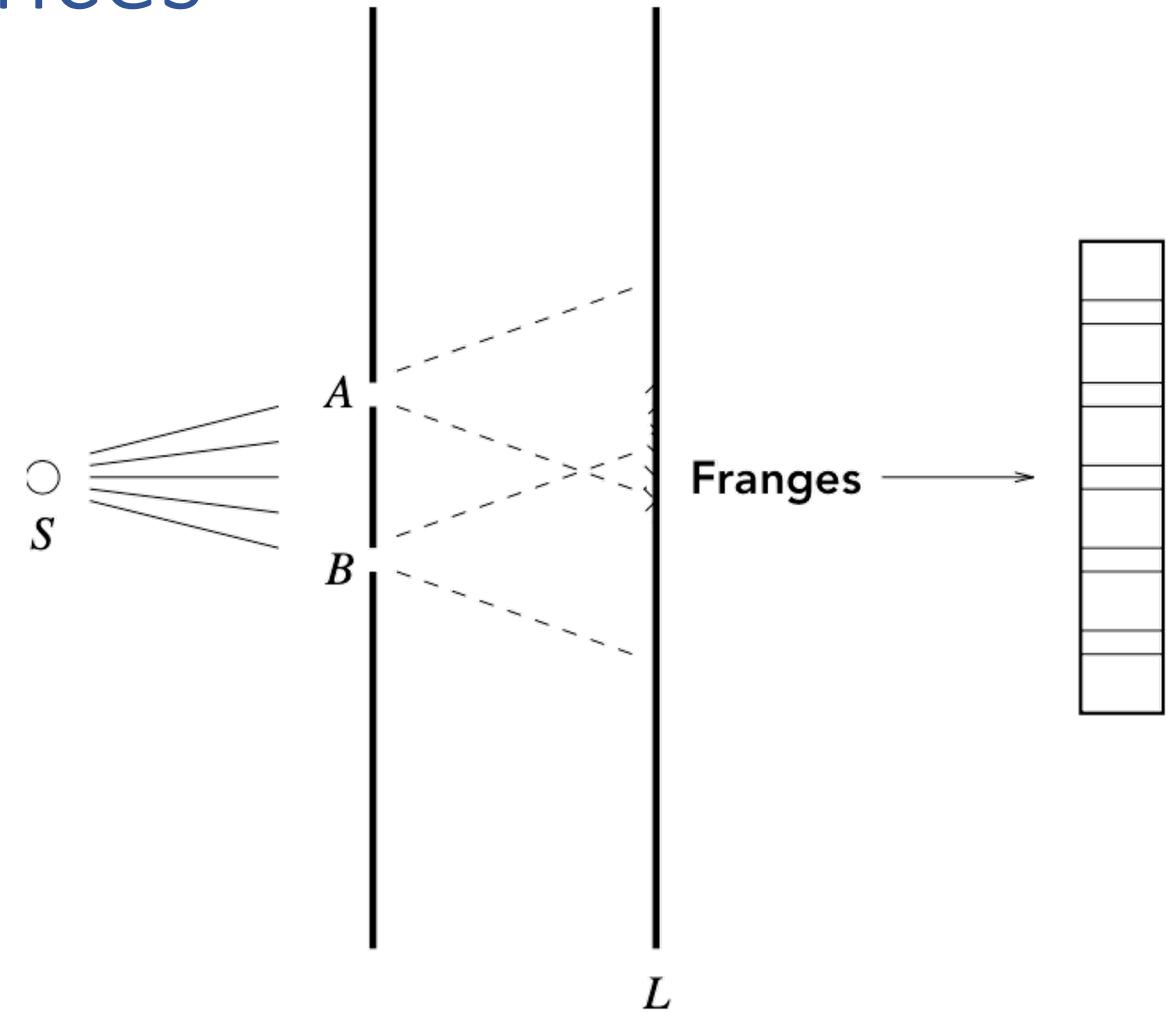


Diagramme de diffraction d'une double fente

Phénomène d'interférences

Comment interpréter l'expérience d'interférence en termes de photons ?

Les franges brillantes résultent de l'arrivée de plusieurs photons, alors qu'aucun photon n'arrive là où des franges sombres sont observées. Il semble donc que les différents photons interagissent entre eux pour donner lieu, sur la plaque L, à une répartition irrégulière des photons, et donc on observe des franges aussi bien claires que sombres.

Si tel est le cas, que va-t-il se passer si nous réduisons l'intensité de la lumière émise par S jusqu'à ce qu'un seul photon à la fois se déplace de la source S à la plaque L ?

Nous devons alors augmenter le temps d'exposition de la plaque L, mais finalement nous retrouverons les mêmes franges d'interférence que celles évoquées précédemment. Ainsi, l'interprétation basée sur l'interaction entre les photons est incorrecte : les photons n'interfèrent pas les uns avec les autres, mais la seule conclusion possible est que l'interférence implique le photon unique.

Phénomène d'interférences

Selon une image corpusculaire, un photon (ou un électron) partant de S et arrivant en L, passe soit par A, soit par B. Si cette description était correcte, nous serions incapables de tenir compte des franges d'interférence. En effet, si le photon passe par A, cela signifie, que la fente B peut être négligée (c'est comme si elle avait été fermée). Le photon devrait pouvoir arriver en tous points de la lame L du diagramme de diffraction produit à partir de A, et donc aussi aux points où apparaissent des franges sombres (de même, si on dit que le photon est passé par la fente B).

Cela signifie qu'une troisième option devrait être admissible, inconcevable du point de vue classique, et différente des états de passage soit par A soit par B. Nous dirons alors que les photons sont dans un état, différent à la fois de A et de B , mais qui devrait « être lié », d'une manière ou d'une autre, à la fois à A et à B. En d'autres termes, il est incorrect de dire que les photons passent par A ou par B, mais c'est comme si chacun d'eux passait, en même temps, à la fois par A et B. Cette conclusion est suggérée par l'interprétation ondulatoire du phénomène d'interférence : si seule la fente A est ouverte, il existe une onde $A(x, y, z, t)$ entre l'écran et L, alors que si seule la fente B est ouverte, il existe une onde $B(x, y, z, t)$ entre l'écran et L. Si maintenant les deux fentes sont ouvertes, l'onde impliquée n'est ni $A(\vec{r}, t)$ ni $B(\vec{r}, t)$, mais $C(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t) + B(\vec{r}, t)$.

Phénomène d'interférences

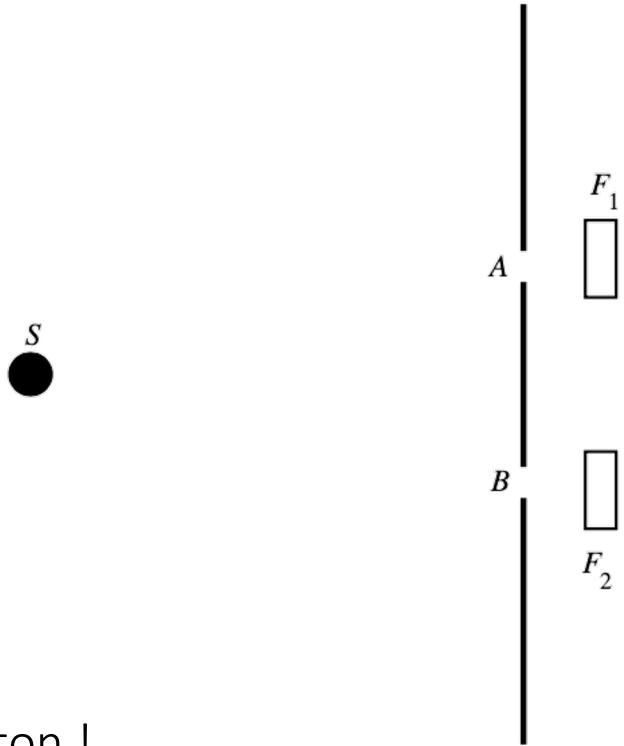
Mais alors, si le photon passe « en partie par A et en partie par B » :

- A quoi devons-nous nous attendre si nous plaçons deux photomultiplicateurs (conversion de l'incidence en signal électrique) F1 et F2 devant A et B, respectivement, et qu'un photon est émis par S ?
- Doit-on s'attendre à ce que F1 et F2 enregistrent, en même temps, le passage du photon ?

Si tel était le cas, nous aurions réalisé, en laboratoire, la « division » d'un photon !

Ce qui se passe, cependant, c'est qu'un seul des deux photomultiplicateurs enregistre le passage du photon, et en répétant l'expérience plusieurs fois, on constate qu'en moyenne, la moitié des événements peut être attribuée à F1 et l'autre moitié des événements peut être attribuée à F2.

Mais il faudra noter cependant que la présence de photomultiplicateurs (mesure!) a rendu impossible l'observation des franges d'interférence, puisque les photons sont complètement absorbés par de tels dispositifs.

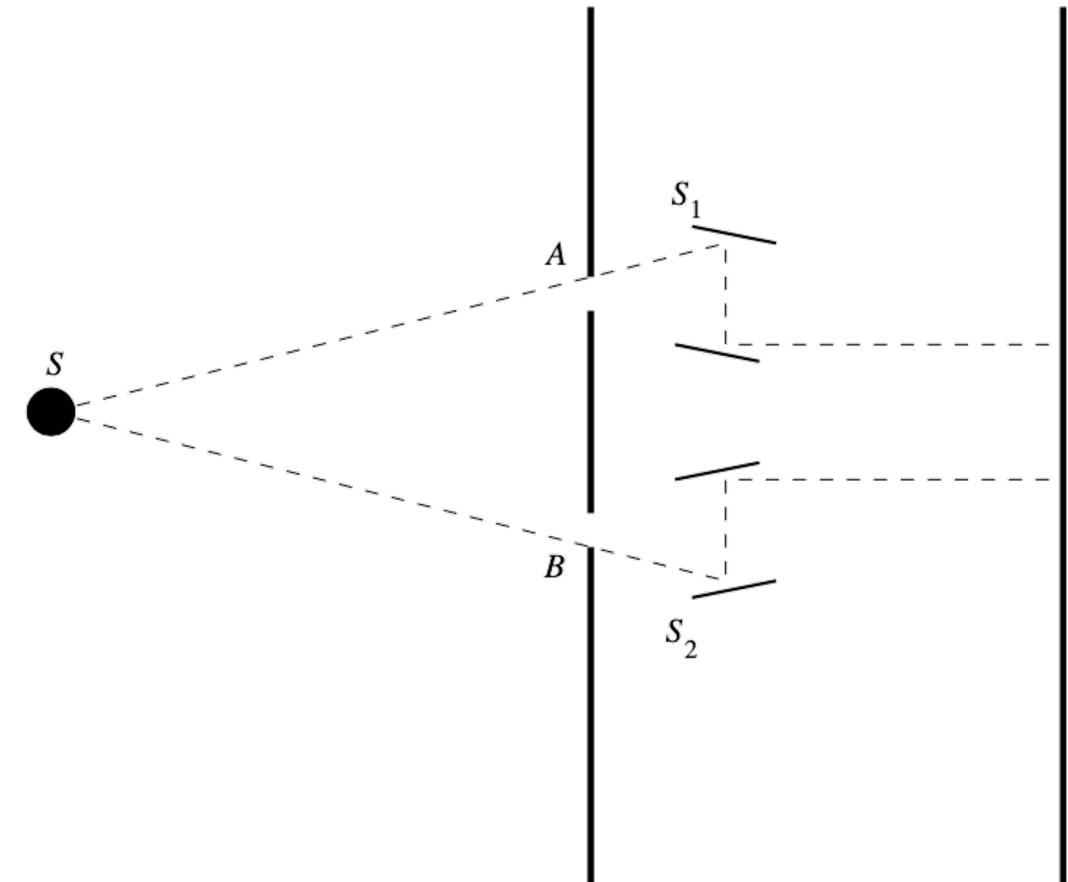


Phénomène d'interférences

A ce stade, on pourrait penser qu'avec l'aide d'une expérience plus sophistiquée, on pourrait encore détecter quel chemin a été suivi par les photons, tout en conservant la possibilité d'observer les franges d'interférence. Pour cela, on pourrait penser à placer un miroir S_1 derrière la fente A, et un autre miroir S_2 derrière la fente B.

De tels miroirs peuvent être déplacés librement, de sorte que, en observant leur recul, on pouvait (en principe) comprendre si le photon passait par A ou, au contraire, par B. Pourtant, encore une fois, le résultat de l'expérience est négatif : si l'on parvient à observer le recul d'un miroir, aucune frange d'interférence n'est détectée.

L'interprétation ondulatoire est la suivante : le recul du miroir affecte le chemin optique d'un des rayons, au point de détruire les franges d'interférence.



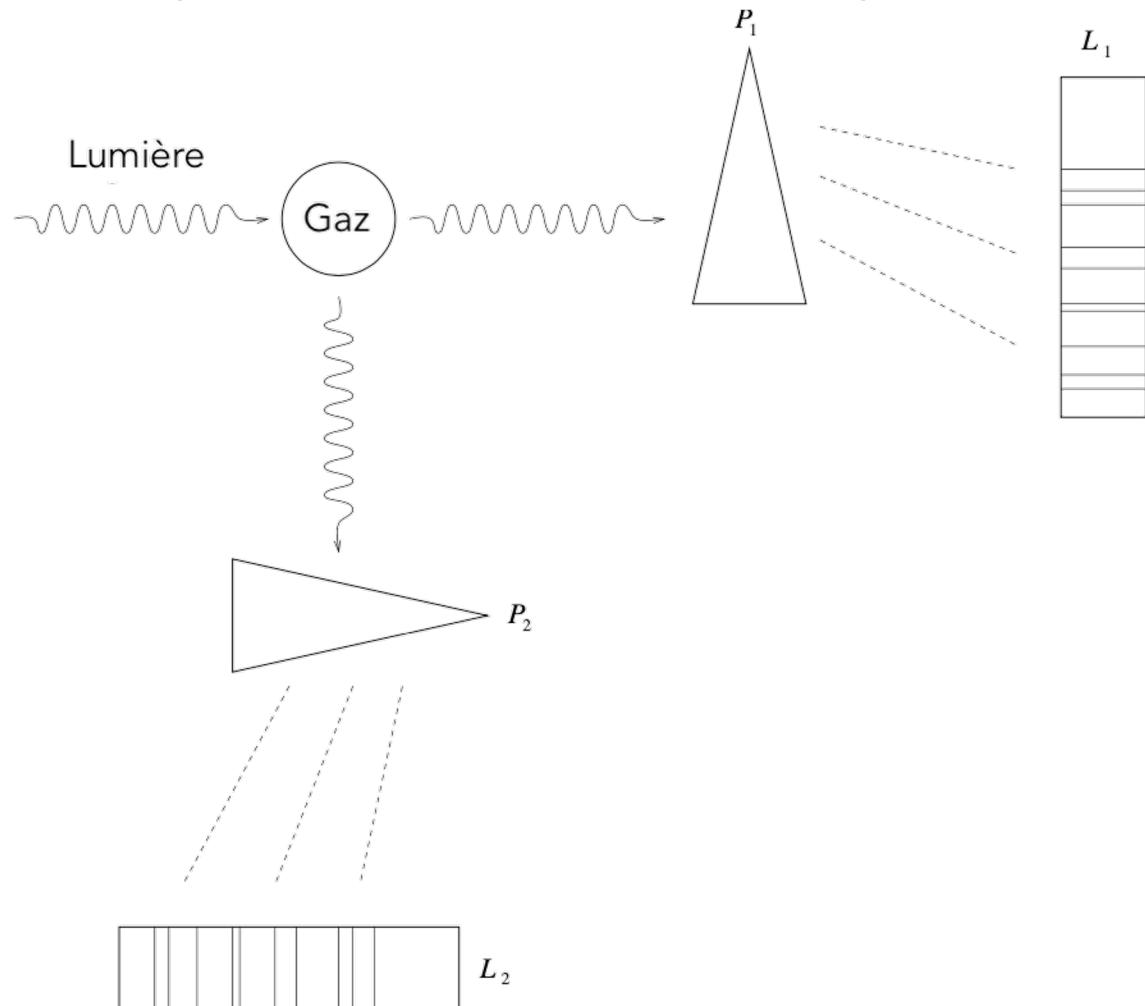
Expérience à double fente complétée par des miroirs

Phénomène d'interférences

En résumé, nous pouvons faire quelques déclarations clés:

- Les franges d'interférence sont aussi observées en envoyant un seul photon à la fois. Ainsi, le photon unique « interfère avec lui-même ».
- Il est incorrect de dire que le photon unique passe par la fente A ou par la fente B. Il existe à la place une troisième option, représentée par un état superposé, qui est profondément lié à la fois à l'état de passage par A et par B.
- Une mesure qui montre si le photon passé par A ou par B perturbe l'état du photon à un point tel qu'aucune frange d'interférence n'est détectée. Ainsi, soit on sait par quelle fente le photon est passé, soit on observe des franges d'interférence. Nous ne pouvons pas atteindre les deux objectifs : les deux possibilités sont incompatibles.

Spectres atomiques – hypothèses de Bohr



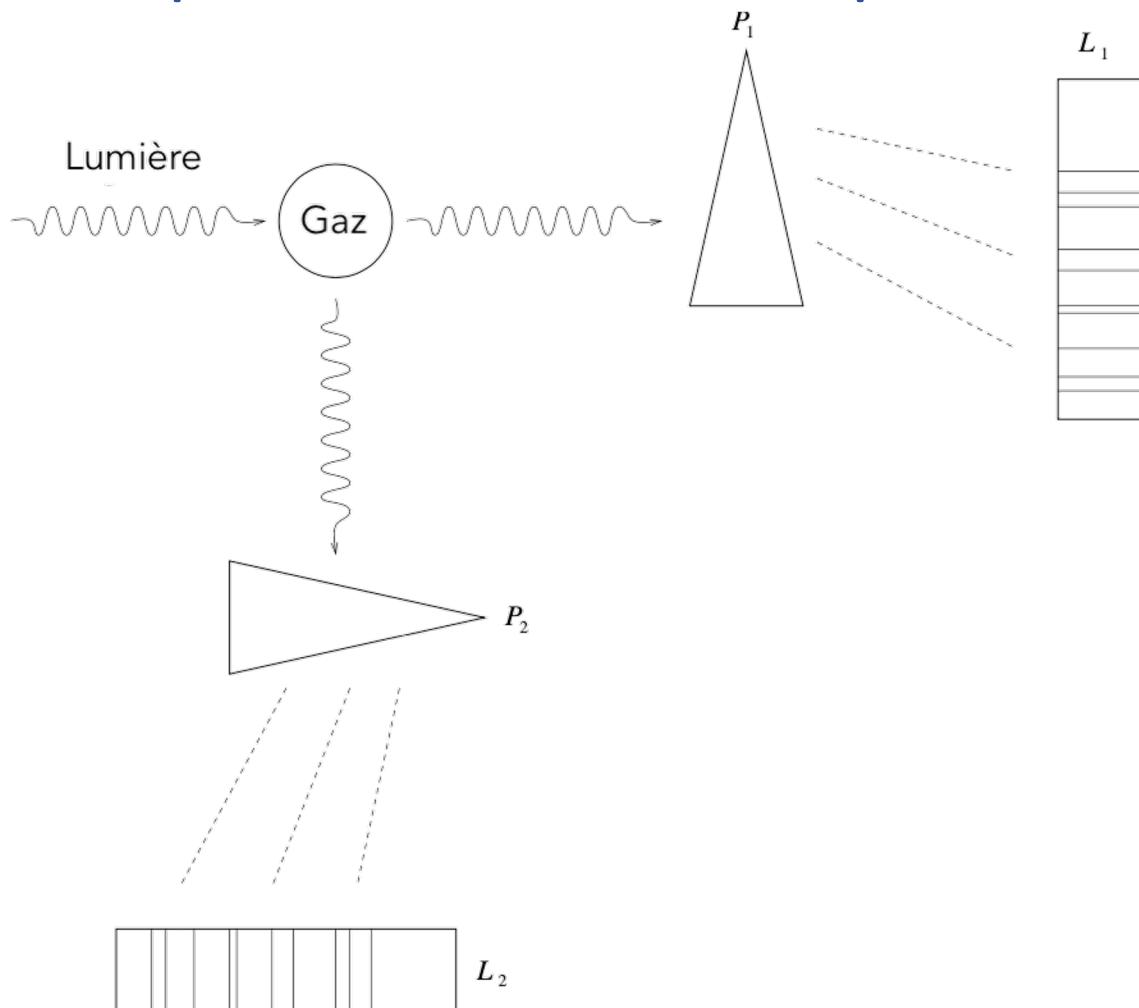
Dispositif expérimental utilisé pour obtenir les spectres d'émission et d'absorption

Les fréquences pouvant être émises par un matériau forment son spectre d'émission, tandis que les fréquences pouvant être absorbées forment son spectre d'absorption.

Absorption:

Une lumière blanche tombe sur un ballon contenant du gaz; un prisme P1, décompose la lumière transmise par le gaz en composants monochromatiques, qui sont collectés sur une plaque L1. Sur L1, on peut voir un spectre continu de lumière transmise par le gaz, interrompu par des lignes sombres correspondant aux fréquences d'absorption du gaz. Ces lignes sombres forment le spectre d'absorption.

Spectres atomiques – hypothèses de Bohr



Dispositif expérimental utilisé pour obtenir les spectres d'émission et d'absorption

Emission:

Pour obtenir le spectre d'émission, il faut transmettre de l'énergie au gaz, qui finira par émettre cette énergie sous forme de rayonnement électromagnétique. Ceci peut être réalisé de différentes manières : en chauffant le matériau, par une décharge électrique, ou en envoyant de la lumière dans le matériau comme nous l'avons décrit auparavant. En se référant à ce dernier cas, si l'on veut analyser la lumière émise, on effectuera nos observations dans une direction orthogonale à celle de la lumière entrante (pour ne pas être dérangé par cette lumière). Un deuxième prisme P_2 est inséré pour décomposer le rayonnement émis par le gaz, et celui-ci est collecté sur la plaque L_2 . Sur L_2 on peut voir, sur un fond sombre, des raies lumineuses correspondant aux fréquences émises par le gaz. Ces raies forment le spectre d'émission.

Spectres atomiques – hypothèses de Bohr

Pour rendre compte des spectres d'émission et d'absorption, Bohr a fait certaines hypothèses (Bohr 1913) qui sont en désaccord avec la physique classique, qui était en effet incapable de rendre compte des propriétés des spectres.

L'idée de base était qu'il existe des orbitales privilégiées stables pour les atomes. Si les électrons de l'atome se trouvent sur l'une de ces orbitales, ils ne rayonnent pas. De telles orbitales sont discrètes, et donc les niveaux d'énergie correspondants sont également discrets. L'ensemble des hypothèses sont les suivantes (Bohr 1913, Herzberg 1944):

Spectres atomiques – hypothèses de Bohr

- Un atome ne peut avoir qu'un ensemble discret d'énergies à partir d'une énergie minimale : $E_1 < E_2 < \dots < E_n < \dots$. L'état d'énergie minimale d'un système atomique est appelé l'état fondamental.
- Lorsqu'un système atomique se trouve dans l'un des niveaux d'énergie discrets ci-dessus, il ne rayonne pas. L'émission (respectivement l'absorption) de rayonnement est associée au passage de l'électron d'une orbitale à une autre d'énergie inférieure (respectivement supérieure).
- Les orbitales autorisées sont celles pour lesquelles le moment cinétique orbital des électrons est un multiple de la constante de Planck.

Spectres atomiques – hypothèses de Bohr

De ces hypothèses, on peut tirer quelques conclusions:

- Les spectres doivent être formés par des raies dont les fréquences sont données par:
$$\nu_{n,m} = \frac{|E_n - E_m|}{h}$$
, pour toute valeur possible de E_n et E_m .
- Les hypothèses de Bohr sont compatibles avec celle d'Einstein. En effet, si un atome rayonne de l'énergie sous forme de quantas discrets, lorsque l'atome émet (ou absorbe) un photon de fréquence ν , son énergie change d'une quantité $h\nu$.
- Les spectres d'émission sont plus riches que les spectres d'absorption de part que, à température ambiante, la grande majorité des atomes sont à l'état fondamental, et donc, en absorption, seules les fréquences $\nu_{1,n} = (E_n - E_1)/h$ sont observées, qui correspondent aux transitions de l'état fondamental E_1 au niveau E_n . Le rayonnement est après réémis en une ou plusieurs transitions vers des niveaux inférieurs, jusqu'à ce que l'état fondamental soit atteint. Ainsi, lors de la phase d'émission, tout le spectre donné par la formule précédente peut être observé.

Spectres atomiques – hypothèses de Bohr

- De la connaissance du spectre d'absorption on peut dériver les énergies E_n , car, une fois la constante h connue, le spectre d'absorption permet de déterminer $E_2 - E_1, E_3 - E_1, \dots, E_n - E_1$ et ainsi de suite, jusqu'à $E_\infty - E_1$. De plus, si on met à zéro l'énergie correspondant au seuil d'ionisation, c'est-à-dire au niveau limite E_∞ , on obtient $E_1 = -h\nu$, où ν est la fréquence limite du spectre.
- Les spectroscopistes avaient pu regrouper les raies d'un spectre (d'émission), de telle manière que les fréquences, ou, plus précisément, les nombres d'onde $1/\lambda = \nu/c$ correspondant aux raies d'un spectre pouvaient s'exprimer comme des différences entre 'termes spectroscopiques' (Balmer 1885):

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = T(n) - T(m) \text{ où } n \text{ et } m \text{ sont des entiers positifs}$$

Selon Bohr, les termes spectroscopiques $T(n)$ ne sont rien d'autre que les niveaux d'énergie divisés par hc :

$$T(n) = -E_n/hc$$

et les différents termes correspondent à des transitions qui partagent le même niveau final.

Partie II: Eléments de base de la physique quantique

Objectif global

Cette partie développe le cadre formel de la physique quantique : les outils mathématiques, la généralisation et l'abstraction de la notion d'état ainsi que le principe d'observable et la notion d'opérateur.

Sommaire

- Kets, bras et opérateurs
- Kets de base
- Représentation matricielle
- Principe de mesure et incertitude
- Position, translation et impulsion

Kets, bras et opérateurs

Les analyses mathématiques de la mécanique quantique font appel à considérer des espaces vectoriels complexes. La formulation des vecteurs de ces espaces vectoriels est faite sous la notation du « *bra* » et du « *ket* » développée par P. A. M. Dirac.

Ces espaces vectoriels complexes sont construits de façon à ce que leur dimensionnalité est spécifiée en fonction de la nature du système physique considéré. Si on s'intéresse, par exemple, à la position (coordonnée) ou l'impulsion d'une particule - où le nombre de cas possibles est innombrablement infini (spectre continu), auquel cas l'espace vectoriel en question sera un espace de Hilbert après D. Hilbert, qui a étudié les espaces vectoriels en dimensions infinies.

Kets, bras et opérateurs

Un état physique, par exemple un atome d'argent avec une orientation de spin définie, est représenté par un vecteur d'état dans un espace vectoriel complexe. Suivant la notation de Dirac, nous appelons un tel vecteur un ket et le notons $|\alpha\rangle$. Ce ket d'état est supposé contenir des informations complètes sur l'état physique du système; tout ce que nous sommes autorisés à demander sur l'état est contenu dans le ket.

Deux kets peuvent être additionnés:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$$

La somme $|\gamma\rangle$ est aussi un ket. Si nous multiplions $|\alpha\rangle$ par un nombre complexe c , le produit résultant $c|\alpha\rangle$ est aussi un ket. Le nombre c peut se trouver à gauche ou à droite d'un ket:

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$$

Remarques:

- Dans le cas particulier où c vaut zéro, le ket résultant est dit ket nul.
- Un des postulats de la physique quantique est que $|\alpha\rangle$ et $c|\alpha\rangle$, avec $c \neq 0$, représentent le même état physique. En d'autres termes, seule la "direction" dans l'espace vectoriel est significative.

Kets, bras et opérateurs

Une observable, telle que les composantes de quantité de mouvement et de spin, peut être représentée par un opérateur, A , dans l'espace vectoriel considéré. Généralement, un opérateur agit sur un ket par la gauche:

$$A.(|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle$$

En général, $A|\alpha\rangle$ n'est pas une constante multipliée par $|\alpha\rangle$. Cependant, il y a des kets d'une importance particulière, connus sous le nom de kets propres de l'opérateur A , notés par:

$$|a'\rangle, |a''\rangle, |a'''\rangle, \dots$$

Avec la propriété:

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, A|a''\rangle = a''|a''\rangle, \dots$$

Où a', a'', \dots sont des nombres.

Kets, bras et opérateurs

L'application de A à un ket propre reproduit simplement le même ket avec un nombre multiplicatif. L'ensemble des nombres $\{a', a'', a''', \dots\}$, noté de manière plus compacte $\{a'\}$, est appelé l'ensemble des valeurs propres de l'opérateur A . Lorsqu'il devient nécessaire d'ordonner les valeurs propres d'une manière spécifique, $\{a^{(1)}, a^{(2)}, a^{(3)}, \dots\}$ peut être utilisé à la place de $\{a', a'', a''', \dots\}$. L'état physique correspondant à un ket propre est appelé un état propre.

Nous avons dit précédemment que la dimensionnalité de l'espace vectoriel est déterminée par le nombre de cas possibles d'une propriété d'un système donné. Plus précisément, Dans un espace vectoriel à N dimensions couvert par les N kets propres de l'observable A , tout ket arbitraire $|\alpha\rangle$ peut s'écrire:

$$|\alpha\rangle = \sum c_{a'} |a'\rangle$$

Avec a', a'', \dots allant jusqu'à $a^{(n)}$ et $c_{a'}$ est un coefficient complexe.

Kets, bras et opérateurs

L'espace vectoriel dont nous venons de parler est l'espace ket. Nous introduisons maintenant la notion d'espace bra, un espace vectoriel dual à l'espace ket.

Pour tout ket $|\alpha\rangle$ il existe un bra, noté $\langle\alpha|$ dans cet espace dual, ou espace de bras. L'espace bra est couvert par des bras propres $\{\langle a'|\}$ qui correspondent aux kets propres $\{|a'\rangle\}$. Il existe une correspondance biunivoque entre un espace ket et un bra :

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\leftarrow CD \rightarrow \langle\alpha| \\ |a'\rangle, |a''\rangle, \dots &\leftarrow CD \rightarrow \langle a'|, \langle a''|, \dots \\ |\alpha\rangle + |\beta\rangle &\leftarrow CD \rightarrow \langle\alpha| + \langle\beta| \end{aligned}$$

Où CD signifie correspondance dual. En gros, nous pouvons considérer l'espace bra comme une sorte d'image miroir de l'espace ket.

Le bra dual de $c|\alpha\rangle$ est postulé être $c^* \langle\alpha|$, est non pas $c \langle\alpha|$, ce qui est un point très important. Généralement, on a:

$$c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \leftarrow CD \rightarrow c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta|$$

Kets, bras et opérateurs

Nous définissons maintenant le produit scalaire d'un bra et d'un ket. Le produit est écrit comme un bra à gauche et un ket à droite, comme suit:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = (\langle \beta |) \cdot (| \alpha \rangle)$$

Ce produit est, en général, un nombre complexe.

Il faut noter qu'en formant un produit scalaire, nous prenons toujours un vecteur de l'espace bra et un vecteur de l'espace ket.

Remarque:

Dans la littérature, ce produit est appelé produit scalaire par analogie avec le produit $a \cdot b$ dans l'espace euclidien. Pour plus de précision, on pourra l'appeler produit scalaire « complexe ».

Kets, bras et opérateurs

On postulera deux propriétés fondamentales des produits scalaires.

Premièrement:

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$$

En d'autres termes, $\langle \beta | \alpha \rangle$ et $\langle \alpha | \beta \rangle$ sont des conjugués complexes l'un de l'autre. On notera que même si le produit scalaire est, dans un sens, analogue au produit scalaire familier $a \cdot b$, $\langle \beta | \alpha \rangle$ doit être clairement distingué de $\langle \alpha | \beta \rangle$; la distinction n'est pas nécessaire dans l'espace vectoriel réel car $a \cdot b$ est égal à $b \cdot a$. En utilisant la règle au-dessus, on peut immédiatement déduire que $\langle \alpha | \alpha \rangle$ doit être un nombre réel. Pour le prouver, on remplacera juste $\langle \beta |$ par $\langle \alpha |$ dans l'équation.

Deuxièmement:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$$

où le signe d'égalité n'est valable que si $|\alpha\rangle$ est un ket nul. Du point de vue de la physique, ce postulat est essentiel pour l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique, comme cela sera discuté ultérieurement.

Kets, bras et opérateurs

Définition: Deux kets $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ sont dits orthogonaux, si:

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0$$

Même si la définition du produit scalaire impose la distinction entre $\langle \alpha | \beta \rangle$ et $\langle \beta | \alpha \rangle$, la relation

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \alpha | \beta \rangle^*$$

implique que : $\langle \beta | \alpha \rangle$ est aussi nul.

Définition: Étant donné un ket qui n'est pas un ket nul, nous pouvons former un ket normalisé $|\tilde{\alpha}\rangle$, où:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} \right) |\alpha\rangle, \text{ avec la propriété: } \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1.$$

Généralement, $\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ est la norme de $|\alpha\rangle$, analogue à la norme $\sqrt{a \cdot a} = |\vec{a}|$ dans un espace vectoriel euclidien.

Remarque: puisque $|\alpha\rangle$ et $c|\alpha\rangle$ représentent le même état physique, l'utilisation des kets normalisés est plus appropriée, pour des raisons de simplification, lorsqu'on traitera d'états physiques.

Kets, bras et opérateurs

Comme nous l'avons mentionné précédemment, les observables comme les composantes de quantité de mouvement et de spin sont représentées par des opérateurs qui peuvent agir sur les kets.

Définition: On dira que les opérateurs X et Y sont égaux, $X = Y$ si:

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle$$

Pour un ket arbitraire dans l'espace des kets en question.

Définition: L'opérateur X est dit un opérateur nul si, pour un ket arbitraire $|\alpha\rangle$, on a:

$$X|\alpha\rangle = 0$$

Les opérateurs peuvent être ajoutés; les opérations d'addition sont commutatives et associatives :

$$\begin{aligned} X + Y &= Y + X \\ X + (Y + Z) &= (X + Y) + Z \end{aligned}$$

Kets, bras et opérateurs

Les opérateurs traités dans ce cours sont tous linéaires:

$$X(c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle$$

Un opérateur X agit sur un bra de la droite:

$$(\langle \alpha|).X = \langle \alpha|X$$

et l'action résultante est un autre bra.

Le ket $X|\alpha\rangle$ et le bra $\langle\alpha|X$ ne sont pas dual l'un par rapport à l'autre. On définira l'opérateur X^\dagger :

$$X|\alpha\rangle \leftarrow CD \rightarrow \langle\alpha|X^\dagger$$

L'opérateur X^\dagger est l'adjoint de l'opérateur X .

Un opérateur X est dit Hermitien, si:

$$X = X^\dagger$$

Kets, bras et opérateurs

Les opérateurs X et Y peuvent être multipliés. Les opérations de multiplication sont, en général, non commutatives:

$$XY \neq YX$$

Cependant, elles sont associatives:

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ$$

on a aussi:

$$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle, (\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY$$

On notera aussi:

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

Car:

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \xleftarrow{CD} (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger$$

Kets, bras et opérateurs

Jusqu'à présent, nous avons considéré les produits suivants : $\langle \beta | \alpha \rangle$, $X|\alpha\rangle$, $\langle \alpha | X$ et XY . Y a-t-il d'autres produits qu'on pourra considérer ?

Multipliant $|\beta\rangle$ et $\langle\alpha|$, dans cet ordre:

$$(|\beta\rangle).\langle\alpha| = |\beta\rangle\langle\alpha|$$

Le résultat doit être considéré comme un opérateur; il est donc fondamentalement différent du produit scalaire $\langle \beta | \alpha \rangle$, qui n'est qu'un nombre.

Remarque:

Il existe également des "produits illégaux". Nous avons déjà mentionné qu'un opérateur agit soit à gauche d'un ket soit à droite d'un bra. En d'autres termes, $|\alpha\rangle X$ et $X \langle\alpha|$ sont des exemples de produits illégaux. Ce ne sont ni des kets, ni des bras, ni des opérateurs ; ils sont simplement absurdes. Des produits comme $|\alpha\rangle |\beta\rangle$ et $\langle\alpha| \langle\beta|$ sont également illégaux lorsque $|\alpha\rangle$ et $|\beta\rangle$ ($\langle\alpha|$ et $\langle\beta|$) sont des vecteurs ket (bra) appartenant au même espace ket (bra).

Kets, bras et opérateurs

Comme mentionné, les opérations de multiplication entre opérateurs sont associatives. En fait, la propriété associative est postulée comme étant généralement valable tant que nous avons affaire à des multiplications "légales" entre kets, bras et opérateurs. Dirac appelle ce postulat important « l'axiome associatif de la multiplication ».

Pour illustrer la puissance de cet axiome, considérons d'abord un produit agissant sur un ket:

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|).|\gamma\rangle$$

En appliquant l'axiome associatif, nous pouvons considérer cela aussi bien que:

$$|\beta\rangle.(<\alpha|\gamma>)$$

où $\langle\alpha|\gamma\rangle$ est juste un nombre.

Ainsi, le produit agissant sur un ket n'est qu'un autre ket ; en d'autres termes, $|\beta\rangle\langle\alpha|$ peut être considéré comme un opérateur. Puisque les deux formes sont égales, nous pouvons tout aussi bien omettre les points et laisser $|\beta\rangle\langle\alpha|\gamma\rangle$ représenter l'opérateur $|\beta\rangle\langle\alpha|$ agissant sur $|\gamma\rangle$ ou, de manière équivalente, le nombre $\langle\alpha|\gamma\rangle$ multipliant $|\beta\rangle$.

Kets de base

En mécanique quantique les opérateurs hermitiens s'avèrent assez souvent être les opérateurs représentant des observables physiques.

Considérons les kets propres et les valeurs propres d'un opérateur hermitien A . Commençons par énoncer un théorème important :

Théorème:

Les valeurs propres d'un opérateur hermitien A sont réelles ; les kets propres de A correspondant aux différentes valeurs propres sont orthogonaux.

Kets de base

Preuve:

Rappelons que:

$$\begin{aligned} A|a'\rangle &= a' |a'\rangle \quad (1) \\ A|a''\rangle &= a'' |a''\rangle \end{aligned}$$

Puisque A est hermitien, nous avons aussi:

$$\langle a''|A = a''^* \langle a''| \quad (2)$$

où a', a'', \dots sont des valeurs propres de A . Si on multiplie les deux côtés de (1) par $\langle a''|$ à gauche, les deux côtés de (2) par $|a'\rangle$ à droite, et on soustrait, on obtient:

$$(a' - a''^*) \langle a''|a'\rangle = 0 \quad (3)$$

Or a' et a'' peuvent être pris soit identiques, soit différents. Prenons d'abord le cas qu'ils soient identiques ($a' = a''$) en considérant le produit scalaire $\langle a''|a'\rangle$ non nul; nous en déduisons ensuite la condition de réalité (première partie du théorème)

$$a' = a'^*$$

Kets de base

Preuve:

Supposons maintenant que a' et a'' sont différents. En raison de la condition de réalité qui vient d'être prouvée, la différence $a' - a''^*$ qui apparaît dans (3) est égale à $a' - a''$, qui, par hypothèse, ne peut pas s'annuler. Le produit scalaire $\langle a'' | a' \rangle$ doit alors s'annuler :

$$\langle a'' | a' \rangle = 0, (a' \neq a'')$$

Ce qui prouve la condition d'orthogonalité (deuxième partie du théorème).

Remarque: Pour des raisons physiques liées au principe de la mesure qu'on traitera après, nous nous attendons à ce qu'une observable ait des valeurs propres réelles. Le théorème qui vient d'être démontré garantit la réalité des valeurs propres chaque fois que l'opérateur est hermitien. C'est pour cette raison qu'on traite d'observables hermitiennes en mécanique quantique.

Kets de base

Propriété:

il est conventionnel de normaliser les kets propres $|a' \rangle$ de façon à ce que $\{|a' \rangle\}$ forme une base orthonormée:

$$\langle a'' | a' \rangle = \delta_{a'' a'}$$

Puisque les kets propres de A forment un ensemble orthonormé complet. Un ket arbitraire dans l'espace ket peut être développé en termes de kets propres de A . En d'autres termes, les kets propres de A doivent être utilisés comme kets de base de la même manière qu'un ensemble de vecteurs unitaires mutuellement orthogonaux est utilisé comme vecteurs de base dans l'espace euclidien.

Etant donné un ket arbitraire $|\alpha \rangle$ dans l'espace ket couvert par les kets propres de A , on pourra le développer comme suit :

$$|\alpha \rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a' \rangle$$

Kets de base

En multipliant à gauche par un $\langle a'' |$ quelconque et en utilisant la propriété d'orthonormalisation, on trouve immédiatement le coefficient de développement:

$$c_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle$$

En d'autres termes, on a:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

En utilisant maintenant l'axiome associatif de la multiplication :

$|a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle$ peut être considéré soit comme le nombre $\langle a' | \alpha \rangle$ multipliant $|a'\rangle$ soit, de façon équivalente, comme l'opérateur $|a'\rangle \langle a'|$ agissant sur $|\alpha\rangle$. Comme $|\alpha\rangle$ dans l'équation au-dessus est un ket arbitraire, nous devons avoir:

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = 1$$

où le 1 doit être compris comme l'opérateur identité. Cette équation est connue sous le nom de relation de fermeture.

Kets de base

Il est difficile de surestimer l'utilité de la relation de fermeture. Étant donné une chaîne de kets, d'opérateurs ou de bras multipliés dans un ordre « légal », nous pouvons insérer, à n'importe quel endroit et à notre convenance, l'opérateur d'identité écrit sous forme de fermeture.

Considérons, par exemple $\langle \alpha | \alpha \rangle$; en insérant l'opérateur d'identité on obtient:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \alpha | \left(\sum_{a'} |a' \rangle \langle a'| \right) | \alpha \rangle = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2$$

Ceci montre que si $|\alpha\rangle$ est normalisé, les coefficients de développement doivent satisfaire:

$$\sum_{a'} |c_{a'}|^2 = \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 = 1$$

Kets de base

Regardons maintenant l'opérateur $|a' \rangle \langle a'|$ qui apparaît dans la relation de fermeture et appliquant le à un ket $|\alpha\rangle$ quelconque:

$$(|a' \rangle \langle a'|) \cdot |\alpha\rangle = |a' \rangle \langle a'| \alpha\rangle = c_{a'} \cdot |a'\rangle$$

Nous voyons que $|a' \rangle \langle a'|$ sélectionne la partie du ket $|\alpha\rangle$ parallèle à $|a'\rangle$. De ce fait, l'opérateur $|a' \rangle \langle a'|$ est appelé l'opérateur de projection le long du ket de base ou ket propre $|a'\rangle$ et est noté $\Lambda_{a'}$:

$$\Lambda_{a'} \equiv |a' \rangle \langle a'|$$

La relation de fermeture peut être écrite maintenant sous la forme:

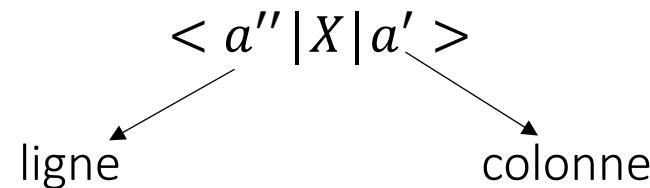
$$\sum_{a'} \Lambda_{a'} = 1$$

Représentation matricielle

Après avoir spécifié les kets de base, nous montrons maintenant comment représenter un opérateur, X , par une matrice carrée. Premièrement, en utilisant la relation de fermeture deux fois, on peut écrire l'opérateur X comme :

$$X = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a''| X |a'\rangle \langle a'|$$

Il existe au total N^2 éléments de la forme $\langle a''|X|a' \rangle$, où N est la dimension de l'espace ket (donc le nombre total de kets propres dans cet espace). Nous pouvons alors organiser ces éléments dans une matrice carrée $N \times N$ telle que les indices de colonne et de ligne apparaissent comme suit :



Représentation matricielle

Explicitement, on peut écrire la matrice sous la forme:

$$X \equiv \begin{pmatrix} < a^{(1)} | X | a^{(1)} > & < a^{(1)} | X | a^{(2)} > & \dots \\ < a^{(2)} | X | a^{(1)} > & < a^{(2)} | X | a^{(2)} > & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Où le symbole \equiv veut dire « représenté par ».

On peut aussi écrire:

$$< a'' | X | a' > = < a' | X^\dagger | a'' >^*$$

Dans le cas particulier où X est hermitien, on a bien sûr:

$$< a'' | X | a' > = < a' | X | a'' >^*$$

Représentation matricielle

Examinons maintenant comment la relation:

$$|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle$$

peut être représentée à l'aide des kets de base. Les coefficients de développement de $|\gamma\rangle$ s'obtiennent en multipliant par $\langle a'|$ à gauche :

$$\langle a'|\gamma\rangle = \langle a'|X|\alpha\rangle = \sum_{a''} \langle a'|X|a''\rangle \langle a''|\alpha\rangle$$

Mais cela peut être vu comme une application de la règle de multiplication d'une matrice carrée par une matrice colonne représentant les coefficients de développement de $|\alpha\rangle$ ($c_{a''} = \langle a''|\alpha\rangle$) et $|\gamma\rangle$ ($c_{a'} = \langle a'|\gamma\rangle$):

$$|\alpha\rangle \equiv \langle a''|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(2)}|\alpha\rangle \\ \langle a^{(3)}|\alpha\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, |\gamma\rangle \equiv \langle a'|\gamma\rangle = \begin{pmatrix} \langle a^{(1)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(2)}|\gamma\rangle \\ \langle a^{(3)}|\gamma\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Représentation matricielle

De même, on a:

$$\langle \gamma | = \langle \alpha | X$$

On pourra alors écrire, par multiplication par $|a'\rangle$ à droite et application de la relation de fermeture:

$$\langle \gamma | a' \rangle = \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | X | a' \rangle$$

Donc un bra est représenté par une matrice ligne, comme suit:

$$\begin{aligned}\langle \gamma | \equiv \langle \gamma | a' \rangle &= (\langle \gamma | a^{(1)} \rangle \quad \langle \gamma | a^{(2)} \rangle \quad \langle \gamma | a^{(3)} \rangle) \\ &= (\langle a^{(1)} | \gamma \rangle^* \quad \langle a^{(2)} | \gamma \rangle^* \quad \langle a^{(3)} | \gamma \rangle^*)\end{aligned}$$

Remarque:

On notera que les éléments de la matrice ligne représentant le bra $\langle \gamma |$ sont les conjugués complexes des éléments de la matrice colonne représentant le ket $|\gamma \rangle$.

Représentation matricielle

Le produit scalaire $\langle \beta | \alpha \rangle$ peut être écrit comme le produit de la matrice ligne représentant $\langle \beta |$ avec la matrice colonne représentant $|\alpha \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle \beta | \alpha \rangle &= \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \\ &= (\langle a^{(1)} | \beta \rangle^* \quad \langle a^{(2)} | \beta \rangle^* \quad \langle a^{(3)} | \beta \rangle^* \dots) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(3)} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Si maintenant nous multiplions la matrice ligne représentant $\langle \alpha |$ avec la matrice colonne représentant $|\beta \rangle$, nous obtenons alors le conjugué complexe de l'expression au-dessus, ce qui est cohérent avec la propriété fondamentale du produit scalaire.

Enfin, la représentation matricielle du produit $|\beta \rangle \langle \alpha|$ peut être facilement déduite:

$$|\beta \rangle \langle \alpha| \equiv \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \beta \rangle \langle a^{(1)} | \alpha \rangle^* & \langle a^{(1)} | \beta \rangle \langle a^{(2)} | \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle a^{(2)} | \beta \rangle \langle a^{(1)} | \alpha \rangle^* & \langle a^{(2)} | \beta \rangle \langle a^{(2)} | \alpha \rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Représentation matricielle

La représentation matricielle d'une observable A devient particulièrement simple si les kets propres de A eux-mêmes sont utilisés comme kets de base. Premièrement, nous avons:

$$A = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a''| A |a'\rangle \langle a'|$$

La matrice $\langle a''|A|a' \rangle$ est évidemment diagonale (Elle est développée dans sa base de kets propres):

$$\langle a''|A|a' \rangle = \langle a'|A|a' \rangle \delta_{a'a''} = a' \delta_{a'a''}$$

Donc:

$$A = \sum_{a''} \sum_{a'} a' \delta_{a'a''} |a''\rangle \langle a'| = \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'|$$

Autrement écrit:

$$A = \sum_{a'} a' \Lambda_{a'}$$

Principe de mesure et incertitude

Après avoir développé quelques aspects mathématiques des espaces ket, nous sommes maintenant en mesure de discuter de la théorie quantique des processus de mesure. Selon Dirac:

« Une mesure fait toujours placer le système dans un état propre de la variable dynamique qui se mesure »

Qu'est-ce que cela signifie? Les mots de Dirac peuvent être interprétés comme suit : avant qu'une mesure de l'observable A ne soit effectuée, le système est supposé être représenté par une combinaison linéaire:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle$$

Lorsque la mesure est effectuée, le système est "jeté" dans l'un des états propres, disons $|a'\rangle$ de l'observable A . En d'autres termes:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{Une mesure}} |a'\rangle$$

Principe de mesure et incertitude

Par exemple, un atome d'argent avec une orientation de spin arbitraire se transformera en $|+\rangle$ (état représentant une orientation « up ») ou $|-\rangle$ (état représentant un état « down ») lorsqu'il est soumis à un dispositif de Stern-Gerlach (voir partie III du cours).

Ainsi, une mesure modifie généralement l'état. La seule exception est lorsque l'état est déjà l'un des états propres de l'observable mesuré, auquel cas:

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{Une mesure}} |a'\rangle$$

Lorsque la mesure fait passer $|\alpha\rangle$ en $|a'\rangle$, on dit que A est mesuré comme étant a' . C'est dans ce sens que le résultat d'une mesure donne l'une des valeurs propres de l'observable mesuré.

Important:

Etant donné $|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle$, qui est l'état ket d'un système physique avant la mesure, on ne sait pas à l'avance dans lequel des différents $|a'\rangle$ le système sera jeté à la suite de la mesure. Nous postulons cependant que la probabilité de sauter dans un certain $|a'\rangle$ est donnée par:

$$P(a') = |\langle a'|\alpha\rangle|^2 = |c_{a'}|^2$$

à condition que $|\alpha\rangle$ soit normalisé.

Principe de mesure et incertitude

Bien que nous ayons parlé d'un seul système physique, pour déterminer empiriquement cette probabilité, il faut considérer un grand nombre de mesures effectuées sur un « ensemble », c'est-à-dire une collection de systèmes physiques préparés à l'identique, tous caractérisés par le même ket $|\alpha\rangle$.

L'interprétation probabiliste du produit scalaire au carré $|\langle a'|\alpha\rangle|^2$ est l'un des postulats fondamentaux de la mécanique quantique, elle ne peut donc pas être prouvée. Notons cependant qu'elle a du bon sens dans les cas extrêmes. Supposons que l'état ket soit $|a'\rangle$ lui-même avant même qu'une mesure ne soit effectuée, la probabilité d'obtenir a' ou, plus précisément, d'être jeté dans $|a'\rangle$ comme résultat de mesure est prédite égale à 1, ce qui est exactement ce à quoi nous nous attendons.

Si, au contraire, on s'intéresse à la probabilité pour le système initialement caractérisé par $|a'\rangle$ d'être jeté dans un autre ket propre $|a''\rangle$ avec $a' \neq a''$, la probabilité est zéro à cause de l'orthogonalité entre $|a'\rangle$ et $|a''\rangle$.

Principe de mesure et incertitude

Nous définissons maintenant la valeur moyenne de A prise par rapport à l'état $|\alpha\rangle$ comme:

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle$$

Pour s'assurer que l'on se réfère à l'état $|\alpha\rangle$, la notation $\langle A \rangle_\alpha$ est parfois utilisée. L'équation précédente est une définition ; cependant, il est en accord avec la notion intuitive de valeur moyenne mesurée car elle peut être écrite comme:

$$\langle A \rangle = \sum_{a'} \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | A | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle$$

En utilisant $\langle a'' | A | a' \rangle = a' \delta_{a'a''}$, on a:

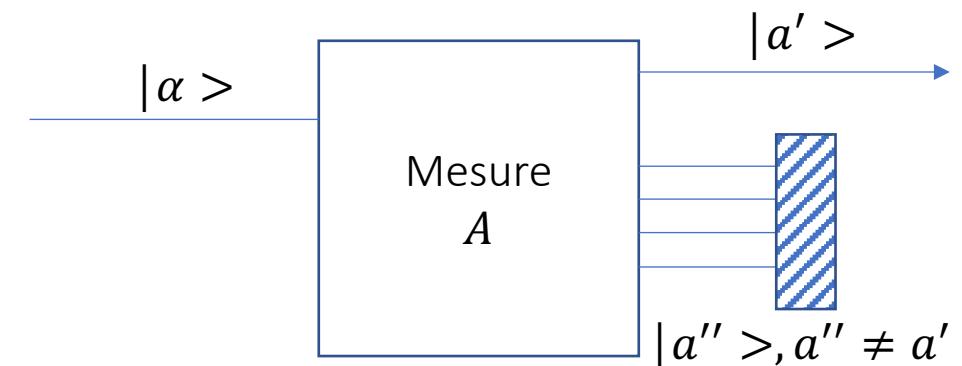
$$\langle A \rangle = \sum_{a'} a' \downarrow \quad \text{Valeur mesurée } a' \quad | \langle a' | \alpha \rangle |^2 \downarrow \quad \text{Probabilité d'obtenir } a' \quad (\text{Analogue à: } \langle X \rangle = \sum_i x_i P_i)$$

Principe de mesure et incertitude

Pour clarifier davantage la signification des mesures en mécanique quantique, on introduit la notion de mesure sélective, ou filtration. Généralement, on peut imaginer un processus de mesure avec un dispositif qui ne sélectionne qu'un seul des kets propres de A , disons $|a' \rangle$, et rejette tous les autres. C'est ce que nous entendons par mesure sélective ; on l'appelle aussi filtration parce qu'on filtre les états propres de A pour ne laisser passer qu'un seul.

Mathématiquement, nous pouvons dire qu'une telle mesure sélective revient à appliquer l'opérateur de projection $\Lambda_{a'}$ à $|\alpha \rangle$:

$$\Lambda_{a'} |\alpha \rangle = |a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle$$



Principe de mesure et incertitude

Définition:

Considérons deux observables A et B . Le commutateur $[,]$ et l'anti-commutateur $\{ , \}$ de ces opérateurs sont définis comme suit:

$$[A, B] = AB - BA$$
$$\{A, B\} = AB + BA$$

On dit que les opérateurs A et B commutent lorsque:

$$[A, B] = 0$$

Intérêt de la commutation:

Considérons les mesures de A et B lorsqu'elles sont des observables qui commutent. Supposons que nous mesurions d'abord A et que nous obtenions le résultat a' . Par la suite, on mesurera B pour obtenir le résultat b' . Si nous mesurions à nouveau A , le formalisme de mesure postule que la troisième mesure donnera toujours a' avec certitude. C'est-à-dire que la deuxième mesure B ne détruit pas l'information précédente obtenue lors de la première mesure A .

Principe de mesure et incertitude

Discutons maintenant de la relation d'incertitude. Pour cela, considérons une observable A et définissons l'opérateur:

$$\Delta A = A - \langle A \rangle$$

Où la valeur moyenne sera prise comme celle d'un état physique considéré. On peut voir facilement que la valeur moyenne de $(\Delta A)^2$ représente la variance de A , car:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Cette variance de l'observable pourra être vu comme une caractéristique du « flou ».

Nous énonçons maintenant la relation d'incertitude. Soit A et B deux observables. Pour tout état considéré nous devons avoir l'inégalité suivante:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2$$

Principe de mesure et incertitude

Pour démontrer cette relation, on acceptera trois lemmes:

Lemme 1: L'inégalité de Schwartz

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2$$

qui est analogue à : $|a|^2 |b|^2 \geq |a \cdot b|^2$ dans l'espace euclidien.

Lemme 2:

La valeur moyenne d'un opérateur hermitien est purement réelle.

Lemme 3:

La valeur moyenne d'un opérateur anti-hermitien, défini comme $C = -C^\dagger$ est purement imaginaire.

Principe de mesure et incertitude

En utilisant lemme 1, avec:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \Delta A | \rangle \\ |\beta\rangle &= \Delta B | \rangle \end{aligned}$$

où le ket vide $| \rangle$ souligne le fait que l'état quelconque $|\alpha\rangle$ ($|\beta\rangle$) est obtenu par application de l'opérateur ΔA (ΔB) à n'importe quel ket. On obtient alors:

$$\langle |(\Delta A)^2| \rangle \langle |(\Delta B)^2| \rangle \geq | \langle |\Delta A \Delta B| \rangle |^2$$

Donc:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq | \langle \Delta A \Delta B \rangle |^2 \quad (*)$$

Où l'herméticité de A et B a été considérée. Pour évaluer la partie droite de l'inégalité, on écrira:

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{ \Delta A, \Delta B \}$$

Où le commutateur $[\Delta A, \Delta B]$, qui est égal à $[A, B]$, est clairement anti-hermitien:

$$([A, B])^\dagger = (AB - BA)^\dagger = BA - AB = -[A, B]$$

Principe de mesure et incertitude

Au contraire, l'anti-commutateur $\{\Delta A, \Delta B\}$ est évidemment hermitien, donc:

Où les lemmes 2 et 3 ont été utilisés. La partie droite de l'équation (*) devient:

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2$$

La preuve de la relation d'incertitude est maintenant complète car l'omission du second terme (l'anti-commutateur) de l'équation au-dessus ne peut que renforcer la relation d'inégalité.

Remarque:

On trouve dans la littérature des développements qui remplacent $\sqrt{<(\Delta A)^2>}$ par ΔA pour écrire la relation d'incertitude sous la forme: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |<[A, B]>|$. Ce développement n'est pas considéré ici pour surligner le fait que ΔA et ΔB sont considérés comme des opérateurs et non pas des nombres.

Position, translation et impulsion

Les observables considérées jusqu'ici ont toutes été supposées présenter des spectres de valeurs propres discrètes. En mécanique quantique, cependant, il existe des observables avec des valeurs propres continues.

Pour développer cette idée d'observables présentant des spectres continus, il est préférable de travailler avec un exemple précis. À cette fin, nous considérons l'opérateur de position (ou coordonnée) dans une dimension. Les kets propres $|x'\rangle$ de l'opérateur de position x satisfaisant:

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle$$

sont supposés former un ensemble complet (une base de l'opérateur). Ici x' est juste un nombre avec la dimension de longueur, 0.23 cm, par exemple. Tandis que x est un opérateur. Un état physique arbitraire peut être étendu en termes de kets de la base $\{|x'\rangle\}$:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle$$

N.B.: On remarquera que la relation de fermeture s'écrit ici sous forme intégrale de par la continuité du spectre de valeurs propres de l'opérateur position sur tout l'espace $[-\infty, \infty]$.

Position, translation et impulsion

La notion de kets propres de position peut être étendue à trois dimensions. L'état ket pour une particule (**avec des degrés de liberté internes, comme le spin, ignorés**) peut être étendu dans ce cas en termes de $\{|x'\rangle\}$ comme suit :

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |X'\rangle \langle X'|\alpha\rangle$$

Où X' représente x' , y' et z' . En d'autres termes, $|X'\rangle$ est un ket propre simultané des observables x , y et z :

$$\begin{aligned} |X'\rangle &\equiv |x', y', z'\rangle \\ x|X'\rangle &= x'|X'\rangle, y|X'\rangle = y'|X'\rangle, z|X'\rangle = z'|X'\rangle \end{aligned}$$

Pour pouvoir considérer un tel ket propre simultané, nous supposons implicitement que les trois composantes du vecteur de position peuvent être mesurées simultanément à un degré de précision arbitraire; par conséquent, nous devons avoir:

$$[x_i, x_j] = 0$$

Où x_1, x_2, x_3 représentent x , y et z , respectivement.

Position, translation et impulsion

Nous introduisons maintenant le concept très important de translation, ou déplacement spatial. Supposons que l'on parte d'un état bien localisé autour de x' . Considérons une opération qui change cet état en un autre état bien localisé, cette fois autour de $x' + dx'$ avec tout le reste (par exemple, la direction du spin) inchangé. Une telle opération est définie comme étant une translation infinitésimale par dx' , et l'opérateur qui fait le travail est noté $T(dx')$:

$$T(dx') |X' \rangle = |X' + dx' \rangle$$

Remarquons que la partie droite de l'équation est aussi un ket propre de position (qui est différent de $|X' \rangle$). Donc, $|X' \rangle$ n'est pas un ket propre de l'opérateur translation.

En développant un ket arbitraire $|\alpha\rangle$ en terme de kets propres de position, on pourra examiner l'effet de la translation infinitésimale sur $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle \rightarrow T(dx') |\alpha\rangle = T(dx') \int d^3x' |X' \rangle \langle X' | \alpha \rangle = \int d^3x' |X' + dx' \rangle \langle X' | \alpha \rangle$$

La dernière partie de l'équation pourra aussi être écrite:

$$\int d^3x' |X' + dx' \rangle \langle X' | \alpha \rangle = \int d^3x' |X' \rangle \langle X' - dx' | \alpha \rangle$$

Position, translation et impulsion

On définira l'opérateur impulsion p , comme:

$$T(dx') = 1 - ip \cdot dx'/\hbar$$

Et on supposera les commutateurs suivant (en plus de celui défini précédemment pour l'opérateur position):

$$\begin{aligned} [x_i, p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \quad (a) \\ [p_i, p_j] &= 0 \quad (b) \\ [x_i, x_j] &= 0 \quad (c) \end{aligned}$$

Ces relations sont très importantes en mécanique quantique. P. A M. Dirac les appelle "conditions quantiques fondamentales". Plus souvent, elles sont connues sous le nom de relations de commutation canoniques ou relations de commutation fondamentales.

Position, translation et impulsion

Remarques:

- La relation de commutation (a) implique que, par exemple, x et p_x (et non pas x et p_y) ne commutent pas. Il est donc impossible de trouver des kets propres simultanés de x et p_x .
- Tenant compte de la de la relation de commutation (a), la relation d'incertitude d'Heisenberg s'écrira:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \hbar^2/4$$

- La relation de commutation (b) implique que p_x , p_y et p_z commutent l'un avec l'autre. On peut donc considérer un ket propre simultané de p_x , p_y , p_z :

$$|P' \rangle \equiv |p'_x, p'_y, p'_z \rangle \\ p_x |P' \rangle = p'_x |P' \rangle, p_y |P' \rangle = p'_y |P' \rangle, p_z |P' \rangle = p'_z |P' \rangle$$

Partie III: Phénomènes quantiques

Objectif global

Cette partie traite des caractères phénoménologiques de certains principes quantiques exploités en ingénierie quantique en introduisant leur principe physique ainsi que quelques moyens de vérification expérimentale et les interprétations qui en découlent.

Sommaire

- Principe de superposition
 - i. Interprétation de la superposition
 - ii. Vérification expérimentale de la superposition
- Intrication quantique
- Corrélation classique et quantique
- Décohérence
 - i. Décohérence et interprétation quantique
 - ii. Décohérence vs. dissipation
 - iii. Ouverture: Décohérence et informatique quantique

Principe de la superposition

Le principe de superposition est au cœur de la mécanique quantique, et c'est l'une des caractéristiques de la mécanique quantique qui marque le plus distinctement la rupture avec les concepts classiques. Formellement, le principe de superposition est enraciné dans la linéarité de l'espace de Hilbert. Puisque les états quantiques sont représentés par des kets dans un espace de Hilbert, nous pouvons former des combinaisons linéaires de ces kets. Le principe de superposition stipule alors qu'une telle combinaison linéaire de vecteurs correspond à nouveau à un nouvel état quantique. Cela signifie que, si les kets $|a'\rangle$ représentent un ensemble complet d'états quantiques, alors la superposition:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle$$

correspond également à un état quantique possible et admissible. Les $c_{a'}$ désignant des coefficients complexes arbitraires. Ainsi, en vertu de la nature égalitaire du principe de superposition, l'état superposé $|\alpha\rangle$ correspond à un état (physique) possible du système de la même manière que les états composants $|a'\rangle$ le sont.

Interprétation de la superposition

Pour comprendre pourquoi le principe de superposition a des conséquences contre-intuitives, l'interprétation correcte d'une superposition en mécanique quantique est cruciale.

Un état de superposition ne représente pas simplement un ensemble classique de ses composants (un tel ensemble est souvent appelé un mélange propre), c'est-à-dire une situation dans laquelle le système quantique est en fait dans un seul des états composants $|a'\rangle$, mais nous ne savons tout simplement pas dans lequel ou lesquels des états il se trouve. Au lieu de cela, chacun des composants $|a'\rangle$ est simultanément présent dans l'état quantique $|\alpha\rangle$.

Cette situation est renvoyée à l'existence d'une cohérence entre ces kets composants. Pour souligner clairement la distinction avec le cas classique, cette superposition quantique sous forme d'une combinaison linéaire est donc souvent appelée superposition cohérente. Une telle superposition des états composants définit un nouvel état (physique) d'un système individuel et pas simplement une distribution statistique des états composants.

Vérification expérimentale

Comment démontrer expérimentalement l'existence de la cohérence et montrer ainsi qu'une superposition est bien différente d'un ensemble (c'est-à-dire un mélange propre) de ses états composants ?

Il existe une méthode générale : une mesure projective directe répétée sur l'état de superposition. Illustrons cette approche par un exemple simple:

La manière la plus directe de confirmer l'existence d'un état de superposition serait d'effectuer une mesure projective de l'observable (opérateur de projection) $\Lambda_\alpha \equiv |\alpha><\alpha|$ sur chaque unité d'un ensemble de systèmes préparés à l'identique. Si nous obtenons un résultat égal à 1 pour chaque mesure et que l'ensemble est suffisamment grand, nous pouvons conclure que les systèmes doivent en effet avoir été préparés, c'est-à-dire existaient, dans un état de superposition $|\alpha>$.

Vérification expérimentale

Un exemple d'expérience qui réalise une telle mesure est l'appareil de Stern-Gerlach (voir Figure). Une expérience typique de Stern-Gerlach se déroule comme suit:

Les atomes d'argent sont chauffés dans un four puis traversent des fentes de collimation et un champ magnétique inhomogène dans la direction z (pour simplifier, nous négligerons les composantes de champ dans les autres directions). Chaque atome d'argent possède 47 électrons, dont 46 sont contenus dans un nuage d'électrons à symétrie sphérique. Ainsi, seul le spin (moment cinétique orbital) du 47e électron donne un moment magnétique net de l'atome dans son ensemble. Nous avons donc affaire à un atome caractérisé par un moment magnétique égal au moment magnétique de spin d'un seul électron.

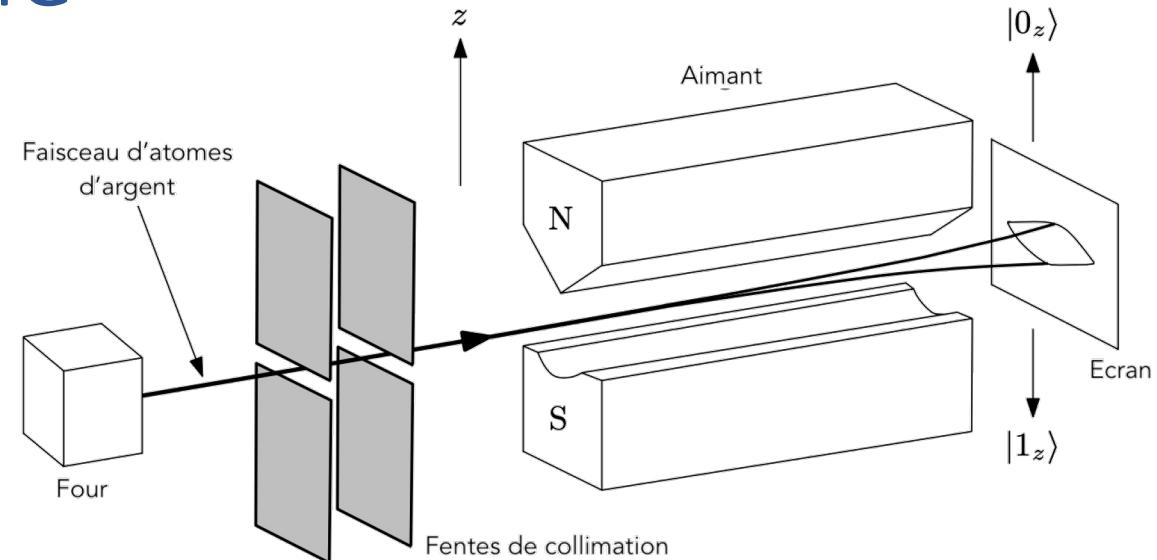


Figure: Illustration schématique de l'expérience Stern-Gerlach. Des atomes d'argent avec un moment magnétique égal au spin d'un seul électron sont émis d'un four et traversent ensuite un champ magnétique inhomogène dans la direction z (l'inhomogénéité est créée, par exemple, par la forme des pièces polaires de l'aimant). Selon l'état de spin, la trajectoire de l'atome est déviée selon deux trajectoires possibles, indiquant ainsi la valeur quantifiée du spin selon l'axe z . Après que de nombreux atomes aient traversé l'appareil, deux bandes distinctes deviennent observables sur l'écran de détection.

Vérification expérimentale

Supposons que nous préparions les atomes entrants dans un état quantique correspondant au ket propre $|0z\rangle$ (état « up » suivant z) d'un opérateur qu'on notera σ_z (opérateur spin dans la direction z). Comme prévu, le motif à l'écran confirmera expérimentalement cette préparation : tous les atomes se trouveront empiler dans la partie supérieure de l'écran.

En même temps, $|0z\rangle$ peut être également réécrit comme une combinaison linéaire d'états « up » et « down » le long de l'axe orthogonal x:

$$|0z\rangle = (|0x\rangle + |1x\rangle)/\sqrt{2}$$

Et l'expérience peut être considérée comme confirmant la préparation de cette superposition. Si la superposition représentait bien un ensemble classique des états $|0x\rangle$ et $|1x\rangle$, c'est-à-dire si chaque électron était en fait dans l'un des deux états, une seule tache dans le centre de l'écran apparaîtrait, car l'inhomogénéité du champ magnétique est orientée selon l'axe z uniquement et n'induirait donc aucune séparation du faisceau d'atomes.

Vérification expérimentale

Bien sûr, ce n'est pas le comportement observé dans l'expérience. Inversement, nous pouvons choisir de faire pivoter l'orientation du champ magnétique de 90° dans la direction x . Dans ce cas, la séparation du faisceau serait observée pour tous les atomes préparés dans l'état initial $|0z\rangle$.

Par conséquent, l'état de superposition $|0z\rangle = (|0x\rangle + |1x\rangle)/\sqrt{2}$ correspond à un état (physique) d'un système individuel dans lequel les composants $|0x\rangle$ et $|1x\rangle$ sont simultanément présents.

Remarque:

On retiendra qu'il existera toujours une orientation du champ magnétique dans l'appareil Stern-Gerlach telle que la trajectoire d'un atome peut être « prédite avec certitude ».

Vérification expérimentale

A noter:

Historiquement, la théorie quantique, et donc le principe de superposition, n'étaient appliqués qu'aux phénomènes microscopiques, par exemple, dans les explications du spectre discret (valeurs discrètes de l'énergie) de l'atome d'hydrogène ou dans les descriptions d'expériences d'interférence avec des particules microscopiques. L'accord entre les prédictions théoriques et les observations expérimentales a démontré explicitement la validité et la puissance du principe de superposition dans le domaine microscopique. Puisque la superposition semblaient être limitées au monde des entités physiques minuscules (telles que les électrons) très éloignées de la portée de l'expérience directe, il n'était pas trop difficile de se convaincre que de telles superpositions étaient simplement une caractéristique particulière du micro-monde.

Cependant, au cours de la dernière décennie, un nombre croissant d'expériences sophistiquées ont démontré la validité du principe de superposition à des échelles de plus en plus grandes, laissant derrière le territoire des superpositions impliquant uniquement des entités microscopiques telles que les électrons et les photons qui avaient été étudiés par les fondateurs de la théorie quantique. Ces expériences ont montré que la disparition de la cohérence quantique, observée par passage à l'échelle macroscopique, peut être attribuée aux interactions avec l'environnement, c'est-à-dire à la décohérence, principe qu'on développera davantage de ce qui suit.

Intrication quantique

Passons maintenant à l'intrication quantique, qui est le processus clé sous-jacent à la décohérence.

Tout d'abord, définissons l'intrication. Supposons que l'on dispose d'un système quantique S , décrit par un vecteur d'état $|\gamma\rangle$, composé de deux sous-systèmes $S1$ et $S2$.

Le vecteur d'état $|\gamma\rangle$ de S est dit intriqué par rapport à $S1$ et $S2$ s'il ne peut s'écrire comme un produit tensoriel des vecteurs d'état de ces deux sous-systèmes, c'est-à-dire s'il n'existe pas de vecteurs d'état $|\alpha\rangle_1$ de $S1$ et $|\beta\rangle_2$ de $S2$ tels que:

$$|\gamma\rangle = |\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2$$

Remarque:

En raisonnant en terme de systèmes intriqués au lieu d'états intriqués, $S1$ et $S2$ sont dits intriqués si l'état du système total S ne peut être exprimé sous la forme du produit tensoriel $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2$, avec $|\alpha\rangle_1$ et $|\beta\rangle_2$ désignant certains vecteurs d'état de $S1$ et $S2$, respectivement.

Intrication quantique

Que signifie notre définition de l'intrication ?

Si $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2$, c'est-à-dire si $S1$ et $S2$ ne sont pas intriqués, alors nous pouvons considérer les deux sous-systèmes $S1$ et $S2$ comme des entités individuelles. Chaque sous-système possède son propre état quantique, qui constitue une description complète de l'état physique du sous-système, et il n'existe pas de propriétés physiques qui pourraient être mesurées uniquement sur le système total S mais qui ne pourraient pas être dérivées de mesures sur les sous-systèmes individuels.

En d'autres termes, les sous-systèmes, bien que considérés comme faisant partie d'un système global plus large, conservent complètement leur individualité. Le tout (le système S) est donc simplement la somme des parties (les sous-systèmes $S1$ et $S2$). Ceci, bien sûr, est la situation familière de la physique classique. Inversement, s'il n'existe pas d'états de sous-système $|\alpha\rangle_1$ de $S1$ et $|\beta\rangle_2$ de $S2$ tels que $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2$, toutes les caractéristiques « classiques » de séparabilité susmentionnées ne sont pas vérifiées. Maintenant, les sous-systèmes $S1$ et $S2$ ne peuvent pas se voir attribuer leurs propres états quantiques ; au lieu de cela, ils ne peuvent être décrits que par un état quantique composite global.

Intrication quantique

Remarque:

Les caractéristiques particulières de l'intrication ont été confirmées dans de nombreuses expériences, par exemple en utilisant des paires de photons intriqués séparées par des distances de plusieurs kilomètres.

L'intrication est également au cœur de la « deuxième révolution quantique » qui concerne les technologies quantiques telles que les ordinateurs quantiques et la cryptographie quantique (une brève discussion sera menée plus tard). Les ordinateurs quantiques seraient capables de résoudre certains problèmes de calcul plus rapidement que n'importe quel ordinateur classique ne pourrait jamais le faire, et la cryptographie quantique permet une communication complètement sécurisée.

Bien qu'il reste à voir si et quand un ordinateur quantique raisonnablement complexe peut être réalisable expérimentalement, la cryptographie quantique représente déjà un domaine relativement mature avec des applications commerciales existantes.

Corrélation classique et quantique

Il est important de noter que les corrélations quantiques (c'est-à-dire l'intrication) sont fondamentalement différentes des corrélations classiques.

En physique classique, les corrélations surviennent souvent en raison de certaines lois de conservation. Par exemple, une particule au repos peut se désintégrer en deux fragments identiques qui, du fait de la conservation de la quantité de mouvement totale, s'envoleront alors à la même vitesse mais en sens opposé. Si nous mesurons la quantité de mouvement de l'un des fragments, nous pouvons donc immédiatement en déduire que la quantité de mouvement de l'autre particule doit être égale en grandeur mais de signe opposé.

Il s'agit d'une corrélation biunivoque purement classique (statistique) entre les deux particules : la quantité de mouvement de chaque fragment "existe" indépendamment de la mesure effectuée sur le premier fragment, et la quantité de mouvement de la seconde particule découle directement de la conservation de la quantité de mouvement.

Corrélation classique et quantique

Dans le cas de l'intrication quantique. L'analogie avec le cas des corrélations classiques tient dans la mesure où, chaque fois que nous mesurons la première particule et trouvons une « impulsion à droite », nous pouvons immédiatement en déduire que la deuxième particule, lors de la mesure, se trouverait toujours dans l'état « impulsion à gauche ».

On peut donc dire que, par le fait de la première mesure, les corrélations quantiques se transforment en corrélations classiques (purement statistiques). On notera, cependant, que dans le contexte quantique, le résultat de la mesure sur la première particule est complètement aléatoire. Nous obtiendrons « impulsion à droite » ou « impulsion à gauche » avec des probabilités égales, mais nous n'avons aucun moyen de prédire quel résultat particulier sera obtenu. Il semblerait donc que l'information sur le résultat de la mesure sur la première particule (qui part à droite ou à gauche) soit apparemment transmise instantanément à la seconde particule (pour qu'elle part à gauche ou à droite), alors qu'elles peuvent être séparées spatialement par une distance aléatoire.

Corrélation classique et quantique

Cela semblerait, à première vue, violer le principe de la relativité restreinte selon lequel aucun signal (classique) ne peut voyager plus vite qu'à la vitesse de la lumière.

Cependant, il n'y a en fait aucune violation de ce genre. Bien que le résultat de la mesure sur la seconde particule soit instantanément fixé par le résultat de la mesure sur la première particule, le caractère entièrement aléatoire de ce dernier résultat signifie qu'aucune information utile ne peut être transmise entre les deux sous-systèmes.

C'est un résultat assez remarquable. La mécanique quantique en soi est une théorie non relativiste qui ne contient aucun axiome explicite qui introduirait des limitations fondamentales sur la vitesse de transmission de l'information, c'est-à-dire que la mécanique quantique ne « connaît » pas la relativité restreinte. Pourtant, sa structure probabiliste impose néanmoins indirectement des contraintes de non signalisation telles que celle décrite ci-dessus.

Corrélation classique et quantique

Une bonne façon de penser à une telle « action mystérieuse à distance » (comme l'a dit Einstein), apparente et instantanée, est de réaliser que l'état intriqué doit avoir été préparé localement en laissant les deux sous-systèmes interagir à un moment donné dans le passé.

Lorsque ces deux sous-systèmes sont alors séparés l'un de l'autre, l'état quantique est simplement étalé (c'est-à-dire délocalisé) sur une plus grande région spatiale. Il n'y a aucune information qui aurait besoin d'être physiquement transmise entre les deux sous-systèmes : l'état intriqué est déjà la description la plus complète pour les sous-systèmes individuels et encapsule toutes les informations possibles sur ces systèmes.

La caractéristique de l'intrication semble suggérer que la nature est fondamentalement non locale : le résultat de la mesure locale sur la seconde particule est déterminé par des corrélations quantiques codées uniquement dans l'état quantique intriqué global du système total.

Décohérence

Dans le cadre quantique, les interactions environnementales ne se résument plus à une simple "perturbation" du système d'intérêt, qui devrait être relaxé (minimisation d'énergie) pour bien décrire la physique de ce système, ou qui pourraient simplement être négligées si ces interactions sont suffisamment faibles (par exemple, dans le cas de l'influence des molécules d'air sur la trajectoire newtonienne d'une boule de billard). Au lieu de cela, le couplage avec l'environnement définit les propriétés physiques observables du système. En même temps, la cohérence quantique, une mesure de la « quantification » du système, est délocalisée dans l'état intriqué système-environnement, ce qui la supprime effectivement de notre observation. Ce processus est généralement irréversible dans la pratique et constitue un élément clé pour expliquer comment le monde classique de notre expérience émerge du substrat quantique sous-jacent. Il y a donc deux conséquences principales, intimement liées, des interactions environnementales (et donc de l'intrication quantique) pour un système quantique :

1. La disparition irréversible de la cohérence quantique, source de phénomènes quantiques tels que les effets d'interférence du système.
2. La « définition » dynamique des propriétés observables du système.

Ces deux conséquences sont regroupées sous le nom de « décohérence » induite par l'environnement.

Décohérence et interprétation quantique

Discutons de l'implication du principe de décohérence dans l'interprétation « standard » de la mécanique quantique telle qu'elle est couramment présentée. Nous distinguons délibérément cette interprétation standard d'autres interprétations comme celle dite de « Copenhague », qui introduit l'hypothèse supplémentaire de la nécessité de concepts classiques fondamentaux et irréductibles pour décrire les phénomènes quantiques, y compris les mesures. Ces interprétations ne seront pas citées dans le cadre de ce cours.

Une caractéristique déterminante de l'interprétation standard est le postulat de réduction. Ce postulat peut être décomposé en plusieurs parties. Il énonce que:

- Toute mesure effectuée sur un système quantique induit une rupture discontinue de l'évolution dans le temps.
- Cette rupture se traduit par la « réduction » du « paquet d'onde », développé en termes d'états propres de l'observable mesuré projetés sur l'un de ces termes. Ainsi, un seul composant dans la superposition des termes est sélectionné comme résultat de la mesure.
- La probabilité d'un résultat particulier est donnée par le produit de l'amplitude au carré entre l'état quantique initial (arbitraire) et l'état quantique correspondant au résultat (voir principe de mesure et incertitude – partie II).

Décohérence et interprétation quantique

L'interprétation standard ne donne aucune explication sur la nature de cette réduction. Malgré le rôle prédominant de la mesure et du postulat de la réduction dans cette interprétation, la définition concrète de « mesure » reste assez floue.

En principe, l'interprétation standard n'exclut pas a priori la possibilité de superpositions macroscopiques d'états « classiques ». En même temps, cela nous indique que de telles superpositions ne pourraient jamais être observées, car toute observation de ce type équivaudrait à une interaction de mesure induisant une réduction. Cependant, la question de savoir ce qui compte précisément comme une mesure n'est pas résolue :

Un observateur humain est-il nécessaire pour provoquer la réduction ?
Quand une interaction donnée induit-elle une réduction, et quand permet-elle au système de continuer à évoluer ?

Décohérence vs. dissipation

La dissipation, la perte d'énergie du système, est un effet classique. Si nous laissons un système interagir avec un autre système (que nous pouvons appeler l'environnement), un échange d'énergie aura souvent lieu entre les deux partenaires, et les systèmes se rapprocheront alors finalement de l'équilibre thermique. L'échelle de temps caractéristique sur laquelle cela se produit est généralement appelée échelle de temps de relaxation pour le système. Si une interaction système-environnement particulière conduit à une dissipation dans le système, alors la force d'interaction système-environnement est une mesure du temps de relaxation.

Cependant, si la dissipation est absente ou négligeable, il ne faut pas en conclure qu'il n'y a pas (ou seulement négligeable) d'interaction entre le système et son environnement. Même si un type particulier d'interaction ne conduit pas à la dissipation, il résultera en général en une décohérence, qui est un effet quantique pur. Autrement dit, l'environnement peut en général obtenir des informations sur le chemin suivi par le système (ou, plus généralement, l'état du système) sans absorber aucune énergie de ce système. Ainsi, la décohérence peut ne pas s'accompagner de dissipation, alors que la présence de dissipation impliquera forcément l'apparition de décohérence.

Décohérence vs. dissipation

Si la dissipation et la décohérence sont toutes les deux présentes, elles se distinguent généralement assez facilement en raison de leurs échelles de temps très différentes. Comme de nombreuses études théoriques et expérimentales l'ont démontré, l'échelle de temps de décohérence est généralement de plusieurs ordres de grandeur plus courte que l'échelle de temps de relaxation. Nous accepterons une estimation empirique du rapport de l'échelle de temps de relaxation τ_r et l'échelle de temps de décohérence τ_d pour un objet massif décrit par une superposition de deux positions différentes à une distance Δx l'une de l'autre:

$$\frac{\tau_r}{\tau_d} = \left(\frac{\Delta x}{\lambda_{dB}} \right)^2$$

Où, λ_{dB} est la longueur d'onde thermique de de Broglie de l'objet:

$$\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{\sqrt{2mk_B T}}$$

Où m est la masse de l'objet, T sa température et k_B est la constante de Boltzmann. cette équation fournit une première estimation générale de l'échelle de temps de décohérence.

Décohérence vs. dissipation

Pour les objets macroscopiques, l'influence dissipative de l'environnement est donc le plus souvent tout à fait négligeable vis-à-vis de la dynamique du système à toute échelle de temps pertinente pour la décohérence induite par cet environnement.

Par exemple, les photons diffusés par une boule de bowling n'affecteront guère le mouvement de la boule, alors qu'ils conduiront à une décohérence quasi instantanée d'un état de superposition (réduction de cet état) contenant des états de positions macroscopiquement distinguables de la boule. Ainsi, cette différence cruciale entre les échelles de temps de relaxation et de décohérence explique pourquoi nous observons que des objets macroscopiques suivent parfaitement des trajectoires newtoniennes avec souvent peu de manifestation de dissipation, comme un ralentissement de l'objet.

Pour reprendre un exemple: la planète Jupiter tourne autour du soleil sur une trajectoire newtonienne depuis des milliards d'années, tandis que son état de mouvement est resté pratiquement insensible à toute perte dissipative (frottement) due à la lumière du soleil dispersée sur la surface de la planète. Si les échelles de temps de relaxation et de décohérence étaient effectivement similaires, ce fait serait évidemment très difficile à expliquer.

Ouverture: Décohérence et informatique quantique

Nous savons tous qu'un ordinateur acheté aujourd'hui sera obsolète quelques années plus tard. La vitesse à laquelle les ordinateurs sont devenus plus rapides au cours des dernières décennies est tout simplement stupéfiante.

En conséquence, la complexité des circuits qui composent le processeur de l'ordinateur (mesurée, par exemple, par le nombre de transistors par puce) continue d'augmenter rapidement. On parlera de la célèbre «loi» de Moore, qui stipule que la complexité du circuit double environ tous les deux ans, une prédiction qui s'est avérée étonnamment précise à ce jour. En conséquence, quelques chercheurs dans les années 1970 et 1980 ont réalisé qu'à un moment donné, les structures de traitement individuelles (par exemple, les transistors) sur une puce devraient atteindre des échelles atomiques auxquelles les effets quantiques deviendraient importants. Ils ont ainsi été amenés à spéculations quant à savoir si ces effets quantiques pourraient en fait être exploités afin d'améliorer la puissance de calcul. Ou, pour le dire encore plus audacieusement, pourrait-on construire un ordinateur dont la puissance dépend spécifiquement d'une utilisation intelligente des principes de la mécanique quantique ?

Ouverture: Décohérence et informatique quantique

Au début de la recherche sur la décohérence, l'accent avait été mis sur les implications fondamentales de la décohérence pour la mesure quantique et la transition quantique-classique en général, la principale caractéristique d'intérêt étant la nature pratiquement irréversible et l'extrême efficacité de la décohérence.

Au cours de la dernière décennie, le domaine du calcul quantique a considérablement élargi cette portée en se concentrant sur le contrôle actif et l'ingénierie des interactions de décohérence. Par exemple, nous avons appris et démontré expérimentalement comment concevoir et manipuler la structure des interactions système-environnement afin d'exploiter et de créer des niches dans l'espace de Hilbert qui sont moins affectées par la décohérence. La correction d'erreur quantique a exprimé l'influence et l'atténuation des effets de décohérence dans le langage d'erreurs discrètes qui peuvent être efficacement « annulées » en exploitant l'effet même qui cause la décohérence, à savoir l'intrication quantique. De nombreux autres exemples, pourraient être énumérés ici. En ce sens, notre compréhension de la décohérence a reçu un coup de pouce significatif des travaux récents sur l'informatique quantique, et nous pouvons nous attendre à ce que de nombreuses autres idées passionnantes sur la décohérence résultent de ce domaine de recherche.

Ouverture: Décohérence et informatique quantique

Le principal obstacle à la réalisation d'un ordinateur quantique est le compromis nécessaire entre le blindage et la contrôlabilité. D'une part, nous devons construire des systèmes élémentaires raisonnablement protégés des interactions indésirables avec l'environnement afin de minimiser la décohérence. En revanche, ces systèmes doivent rester suffisamment ouverts pour permettre leur contrôle cohérent afin d'effectuer le calcul quantique.

À ce jour, il n'a été possible de contrôler de manière cohérente qu'une poignée de systèmes, bien trop peu nombreux pour permettre la réalisation d'un quelconque calcul quantique utile. Il reste à voir si, et quand, il sera possible de prolonger suffisamment les temps de décohérence pour permettre la construction d'un ordinateur quantique fonctionnel. Quoi qu'il en soit, les recherches sur les stratégies de lutte contre la décohérence suscitées par l'intérêt pour l'informatique quantique se sont également avérées fructueuses pour améliorer notre compréhension de la décohérence elle-même, tant dans le domaine théorique qu'expérimental.