



## INTRODUCTION A LA MECANIQUE QUANTIQUE

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m_o} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi = E\psi$$



Alain VIVIER, Gérald LOPEZ

# SOMMAIRE

<b>.CHAP. 1</b>	<b>LA DECOUVERTE DU PHOTON: DUALITE ONDES CORPUSCULES.....</b>	<b>2</b>
1	Hertz: l'électromagnétisme et la lumière.....	2
2	Maxwell et la théorie cinétique des gaz.....	3
3	Max Planck et le rayonnement de corps noir.....	4
4	L'apport d'Einstein .....	5
5	Louis de Broglie et les ondes de matières.....	6
<b>.CHAP. 2</b>	<b>L'EXPERIENCE DES FENTES D'YOUNG. NOTION D'AMPLITUDE DE PROBABILITE .....</b>	<b>7</b>
1	L'expérience des fentes d'Young en optique classique.....	7
2	L'expérience des fentes d'Young dans une approche corpusculaire.....	9
<b>.CHAP. 3</b>	<b>L'EQUATION DE SCHRÖDINGER .....</b>	<b>11</b>
1	Etablissement de l'équation de Schrödinger .....	11
2	Equation de Schrödinger indépendante du temps. Notion de valeur propre .....	12
<b>.CHAP. 4</b>	<b>LES POSTULATS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE .....</b>	<b>14</b>
1	L'espace de travail. Le formalisme de DIRAC .....	14
2	Commutation d'observables.....	17
3	Théorème d'Erhenfest.....	19
4	Inégalités d'Heisenberg.....	20
5	Paquets d'ondes. Vitesse de phase. Vitesse de groupe .....	21
<b>.CHAP. 5</b>	<b>LE MOMENT CINETIQUE EN MECANIQUE QUANTIQUE .....</b>	<b>23</b>
1	Moment cinétique en physique classique .....	23
2	Moment cinétique et équation de Schrödinger.....	24
3	Les opérateurs moment cinétique.....	25
4	Addition de moment cinétique.....	26
5	Notion de spin intrinsèque.....	27
6	Notions de statistique: bosons et fermions .....	29
7	Notion de parité.....	32
<b>.CHAP. 6</b>	<b>PHENOMENES TRANSITOIRES .....</b>	<b>33</b>
1	Problématique.....	33
2	Théorie des perturbations dépendant du temps.....	33
3	Approche expérimentale. Largeur naturelle.....	35

## .CHAP. 1 LA DECOUVERTE DU PHOTON: DUALITE ONDES CORPUSCULES

La mécanique quantique est née d'interactions (au sens large) tant conceptuelles que physiques. Elle se situe à l'interface de deux domaines de la physique émergeant vers la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle, l'électromagnétisme et la physique statistique, et s'applique à l'étude de phénomènes d'interaction entre la matière et le rayonnement. On retrouve ici en germe la notion de dualité onde-corpuscule qui a suscité tant de difficultés et fait toujours couler beaucoup d'encre.

### 1 HERTZ: L'ÉLECTROMAGNÉTISME ET LA LUMIÈRE.

En 1888 Heinrich Hertz, tenant de l'hypothèse "continue" (opposée à l'atomisme), va parachever la théorie électromagnétique de Maxwell (1873) en montrant que les ondes électromagnétiques se propagent à la vitesse de la lumière et obéissent aux mêmes lois (réflexion, interférences etc.). En faisant ces expériences, et utilisant entre autres un générateur d'étincelles, il constate incidemment un effet de la lumière ultraviolette sur la production des étincelles. Ne pouvant expliquer l'origine de ce phénomène, il propose à deux de ses élèves (Hallwarch et Lénard) de poursuivre dans ce sens avec un travail de thèse. Ceux-ci ne sauront trouver l'origine de cet effet, appelé effet photoélectrique, mais ils en donneront une description précise et notamment que :



- lorsque l'intensité de la lumière varie à fréquence constante, le nombre de porteurs de charge varie mais pas leur énergie cinétique.
- -le phénomène est immédiat et présente, pour un matériau donné, un seuil en fréquence.

A elles seules, les lois de l'électromagnétisme ne peuvent expliquer ces constatations expérimentales.

La pièce manquante de l'énigme sera fournie par Boltzmann et par Planck, mais de nouveau c'est Maxwell que l'on retrouve à l'origine.

## 2 MAXWELL ET LA THÉORIE CINÉTIQUE DES GAZ.

Le principe fondamental (hypothèse d'Avogadro) est que le nombre de molécule dans un volume donné à pression et température données est toujours le même (gaz parfait).

En partant d'un modèle microscopique collisionnel, Maxwell trouve une loi de répartition statistique des vitesses à l'équilibre et surtout retrouve les lois macroscopiques classiques.

( $PV = nRT$ ) .

Il trouve entre autres que l'énergie cinétique moyenne d'une

molécule vaut:  $E = \frac{3}{2} \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{N}} T$

$\mathcal{R}$  étant la constante des gaz parfait et  $\mathcal{N}$  la constante d'Avogadro.



Ludwig Boltzmann, pionnier de la thermodynamique statistique, développe le concept de Maxwell et relie l'évolution (entropie) d'un système à la probabilité, i.e. le "nombre de

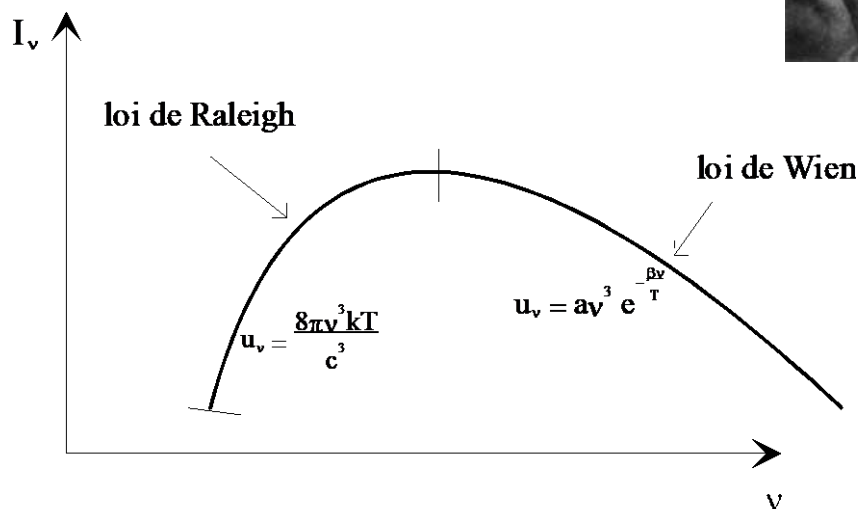
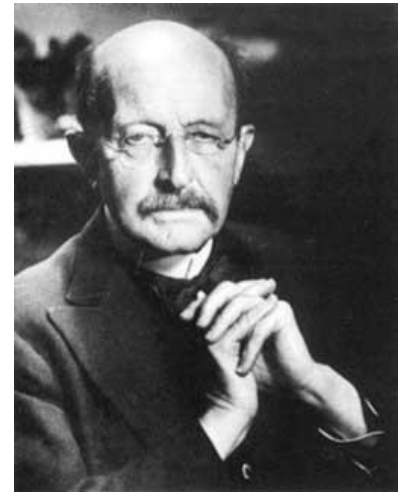
complexions "  $W$  de ce système par la formule:  $S = \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{N}} \ln W$

$\frac{\mathcal{R}}{\mathcal{N}} = k$  est appelée constante de Boltzmann.

Cette relation nous dit entre autres que l'état d'équilibre macroscopique d'un système constitué d'un grand nombre de particules est l'état qui, à énergie donnée, possède le plus grand nombre de configurations microscopiques possibles, ou, autrement dit, qu'un système tend toujours vers l'état d'équilibre de plus grande probabilité.

### 3 MAX PLANCK ET LE RAYONNEMENT DE CORPS NOIR.

Le rayonnement de corps noir est le rayonnement caractéristique en équilibre avec un milieu matériel à une température donnée. Ce rayonnement ne dépend pas de la nature du milieu matériel. Ce constat empirique a très longtemps intrigué les physiciens qui ont cherché un modèle théorique permettant de retrouver le spectre expérimental. Certains physiciens avaient pu reconstruire ce spectre de façon parcellaire:



En utilisant des outils de thermodynamique statistique, en discrétisant les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement à l'équilibre puis en postulant que ces échanges se font par paquets d'énergie proportionnels à la fréquence du rayonnement :

$$E = hv$$

(  $h$  étant la constante de Planck) Planck en 1901 trouve une formule qui permet de reconstruire le spectre complet:

$$u_v = \frac{8\pi hv^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}$$

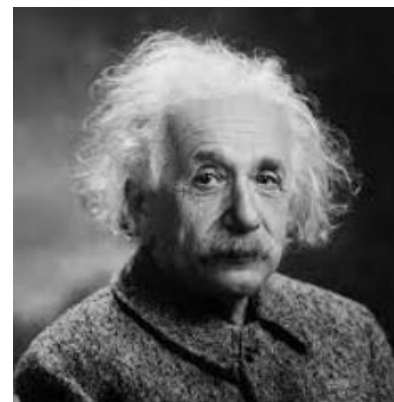
Planck refusera longtemps d'accorder une signification physique réelle à cette quantification "mathématique" en considérant toujours le rayonnement électromagnétique comme un flux continu et homogène.

## 4 L'APPORT D'EINSTEIN .

Il reprend en 1905 les calculs de Planck en supposant que le rayonnement électromagnétique **est constitué** de corpuscules transportant l'énergie  $h\nu$ :

*"Il existe une profonde différence formelle entre les représentations théoriques que se sont forgées les physiciens à propos des gaz et des autres corps pondérables, et la théorie de Maxwell des processus électromagnétiques dans ce qu'il est convenu d'appeler l'espace vide [...].*

*Selon la théorie de Maxwell, l'énergie doit être conçue, pour tous les phénomènes purement électromagnétiques, et donc également pour la lumière, comme une fonction continue de l'espace, alors que l'énergie d'un corps pondérable doit, selon la conception actuelle des physiciens, être décrite comme une somme portant sur les atomes et les électrons.[...]*



*La théorie ondulatoire de la lumière opérant avec des fonctions d'espace continues s'est avérée parfaite pour ce qui est de la description des phénomènes purement optique et il se peut qu'elle ne soit jamais remplacée par une autre théorie.[...]*

*Il n'est pas inconcevable [...] que la théorie de la lumière qui opère sur des fonctions continues de l'espace puisse conduire à des contradictions avec l'expérience lorsqu'elle est appliquée aux phénomènes de production et de transformation de la lumière.*

*De fait, il me semble que les observations portant sur le "rayonnement noir", la photoluminescence, la production de rayons cathodiques par la lumière ultraviolette, et d'autres classes de phénomènes concernant la production ou la transformation de la lumière, apparaissent comme plus compréhensibles si l'on admet que l'énergie de la lumière est distribuée de façon discontinue dans l'espace. Selon l'hypothèse envisagée ici, lors de la propagation d'un rayon lumineux émis par une source ponctuelle, l'énergie n'est pas distribuée de façon continue sur des espaces de plus en plus grand, mais est constituée d'un nombre fini de quanta d'énergie localisés en des points de l'espace, chacun se déplaçant sans se diviser et ne pouvant être absorbé ou produit que tout d'un bloc.*

*Dans ce qui suit, je vais présenter le cours des idées et relater les faits qui m'ont conduit au point de vue ici exposé, dans l'espoir que d'autres chercheurs pourront en tirer profit.[...]*

A. Einstein

*"Un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière"*  
(Annalen der Physik, 1905)

En effectuant des calculs similaires aux calculs de thermodynamique statistique portant sur les gaz, il retrouve la formule de Planck. Sa position lui permet de plus d'expliquer le phénomène photoélectrique dans son intégralité, ce qui renforce la validité de son postulat de départ. Il faut noter que très rapidement Einstein va formuler une théorie quantique de l'absorption et de l'émission de la lumière qui est le fondement de la technique laser. Ces "corpuscules lumineux" prendront plus tard l'appellation de photons.

La dualité onde-corpuscule fait alors son apparition et de grandes polémiques vont s'engager sur la nature profonde de la lumière, puis de la matière. La vision qui s'en dégagera bouleversera profondément le regard de l'homme sur le monde qui l'entoure.

L'aspect corpusculaire de la lumière sera définitivement démontré en 1923 par Arthur H. Compton par des expériences de diffusion élastique sur des électrons.

## 5 LOUIS DE BROGLIE ET LES ONDES DE MATIÈRES.

Considérons la lumière sous son aspect classique, c'est à dire ondulatoire. Une onde est alors déterminée par sa fréquence  $\nu$  et sa longueur d'onde  $\lambda$ , ou plutôt par son vecteur d'onde  $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$ .

Nous pouvons utiliser ces quantités pour donner une représentation corpusculaire de la lumière. On peut en effet considérer un flux monochromatique comme étant constitué de photons transportant l'énergie  $E = h\nu$  et d'impulsion  $\vec{p} = \frac{h\nu}{c} \vec{u}$



(En effet une équation de relativité restreinte nous dit que  $E_{\text{tot}}^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$  donc pour  $M = 0 \Rightarrow E = Pc \Rightarrow p = \frac{h\nu}{c}$ )

L'idée géniale de De Broglie (1923), inspirée par la quantification du cortège électronique dans le modèle de Bohr, fut de renverser ces relations et d'attribuer à un corpuscule matériel d'énergie totale  $E$  et d'impulsion  $p$  *une onde de matière* de fréquence  $\nu = \frac{E_{\text{tot}}}{h}$  et une longueur d'onde  $\lambda = \frac{h}{p}$ , fondant ainsi la *mécanique ondulatoire*.

Cette hypothèse fut brillamment confirmée par une expérience de diffraction d'électrons par des cristaux, phénomène purement ondulatoire (Davisson et Germer, 1927).

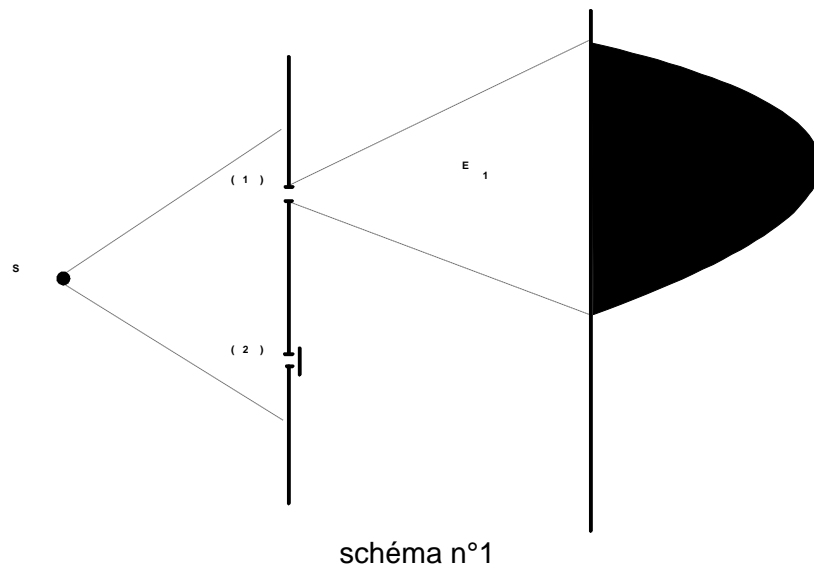
Nous allons arrêter ici notre progression historique et essayer, sur une description expérimentale, de dégager l'essentiel des conceptions et des conséquences de la mécanique quantique



## .CHAP. 2 L'EXPÉRIENCE DES FENTES D'YOUNG. NOTION D'AMPLITUDE DE PROBABILITÉ

### 1 L'EXPÉRIENCE DES FENTES D'YOUNG EN OPTIQUE CLASSIQUE

Nous allons considérer le système expérimental constitué par une source lumineuse éclairant un écran percé de deux fentes. On observe alors l'image qui se forme sur un écran de projection. Nous nous plaçons tout d'abord dans le cadre de la physique classique en considérant l'aspect ondulatoire de la lumière.



L'onde lumineuse (champ électromagnétique) d'amplitude  $E_1$  passant par la fente (1), la fente (2) étant obturée, provoque un éclairement proportionnel à  $|E_1|^2$  et qui a l'allure indiquée sur le schéma n° 1, en négligeant les phénomènes de diffraction aux bords des fentes.

De même, si l'on obture seulement la fente (1), on obtient la figure suivante:

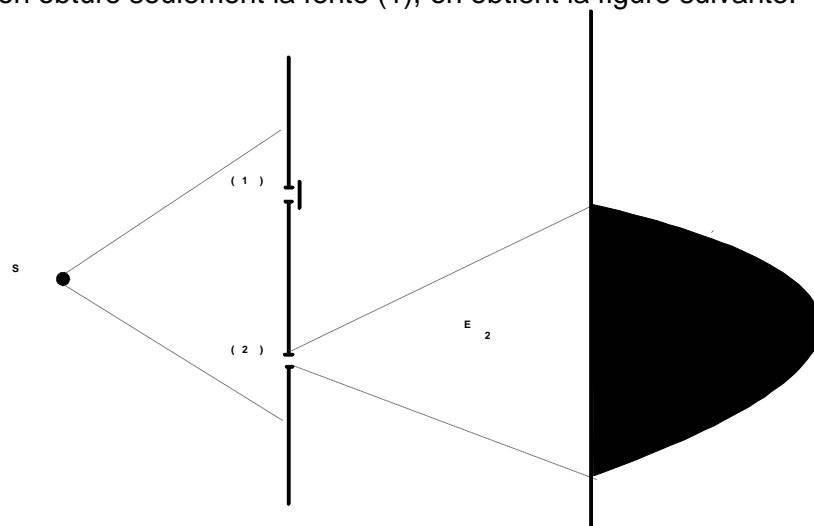




schéma n°2

En ouvrant les deux fentes, on pourrait s'attendre à obtenir une image résultant de la somme des deux images précédentes:

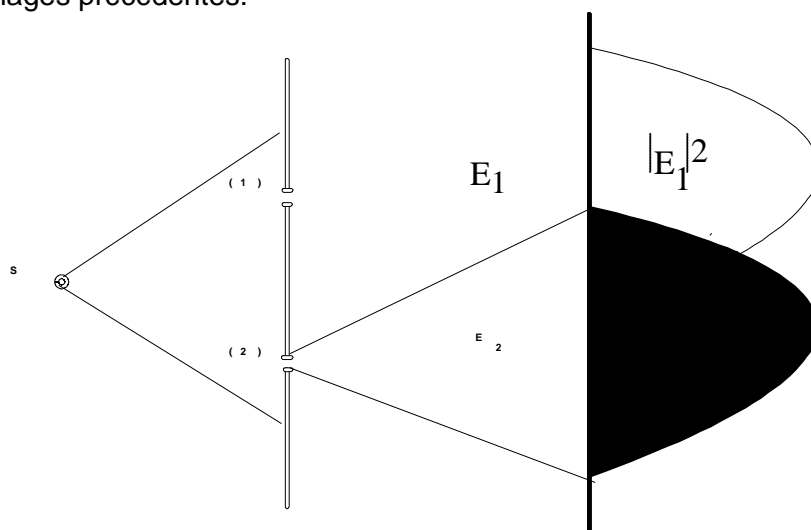


schéma n°3

or il n'en est rien et l'on obtient de fait une figure caractéristique des phénomènes d'interférences, avec une succession de zones sombres et de zones claires:

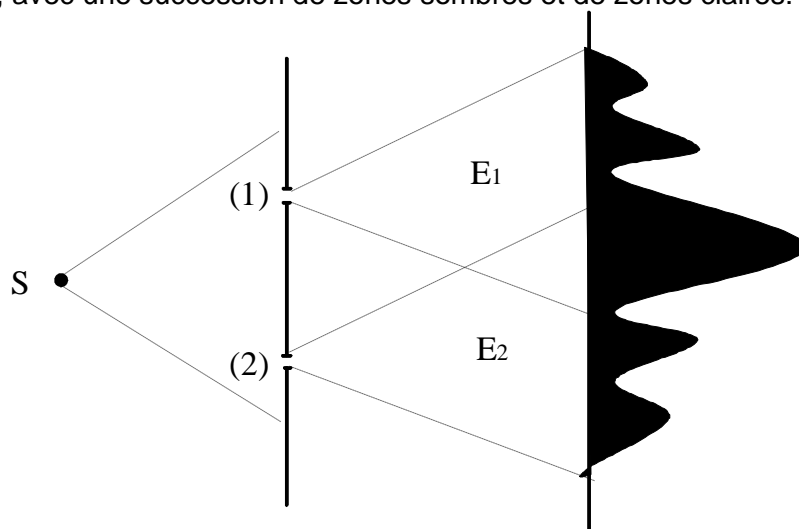


schéma n°4

Cet aspect se comprend très bien si l'on admet le postulat de superpositions des ondes, à savoir que l'onde résultante éclairant l'écran est l'onde  $E_1 + E_2$ . L'éclairement observable sur l'écran est proportionnel à l'énergie déposée par l'onde lumineuse, cette énergie étant elle même proportionnelle à la moyenne temporelle du carré de l'amplitude de l'onde, résumée sur le schéma par  $|E_1 + E_2|^2$ .

Si l'on considère une expression ondulatoire des ondes du type:

$$E_1 = E_0 \cos(k \cdot x - \omega t) \quad E_2 = E_0 \cos(k \cdot x - \omega t + \psi(x))$$

$x$  étant l'abscisse définie sur l'écran de projection et  $\psi(x)$  représentant le déphasage d'origine géométrique des deux ondes cohérentes en ce point. Nous avons alors:

$$E_1 + E_2 = 2 E_0 \cos \frac{\psi}{2} \cos(kx - \omega t + \frac{\psi}{2}) \quad (\cos a + \cos b = \cos \frac{a+b}{2} \cos \frac{a-b}{2})$$

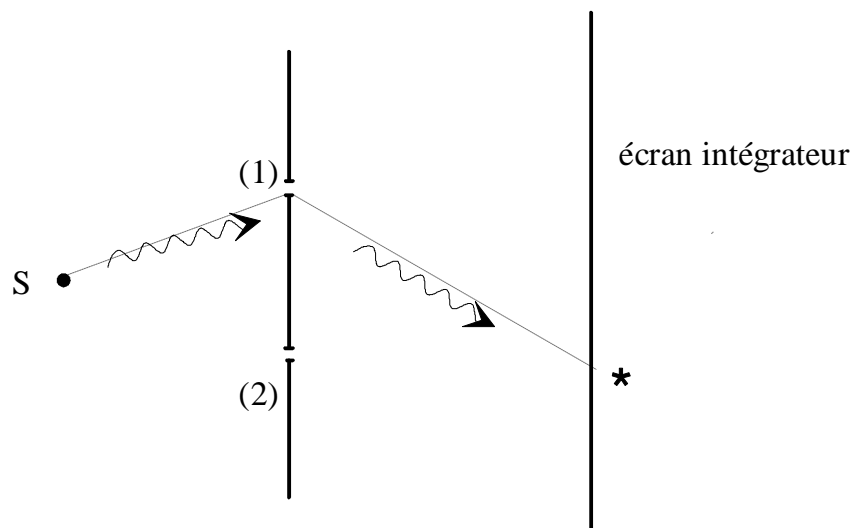
La moyenne temporelle du carré de cette onde  $\frac{1}{T} \int_0^T |E_1 + E_2|^2 dt$  est proportionnelle à  $E_0^2 \cos^2 \frac{\Psi(x)}{2}$ . On voit donc que le terme de déphasage géométrique peut être constructif ou destructif, ce qui rend bien compte des figures d'interférences. Notons que la somme  $|E_1|^2 + |E_2|^2$  ne contient pas de terme d'interférences. On voit donc dans ce cas classique la pertinence de la description ondulatoire.

Nota : on utilise souvent une notation complexe pour représenter une onde :

$$E = E_0 e^{i(k \cdot x - \omega \cdot t)}$$

## 2 L'EXPÉRIENCE DES FENTES D'YOUNG DANS UNE APPROCHE CORPUSCULAIRE.

Reprenons notre montage expérimental précédent et diminuons maintenant l'intensité de la source lumineuse jusqu'à ce que l'on puisse considérer que les photons sont émis **un par un** dans des directions aléatoires. Nous sommes donc passés d'une description ondulatoire du flux lumineux à une description corpusculaire. Nous pourrions donc raisonner comme si cette expérience était réalisée avec une mitrailleuse émettant des projectiles dont la nature corpusculaire ne fait aucun doute. L'expérience, ou plus simplement l'intuition, nous montre que nous n'obtenons pas avec de tels projectiles macroscopiques de termes d'interférences.



Nous devrions donc nous attendre à obtenir une répartition des points d'impact des photons se répartissant statistiquement suivant une distribution représentée par le schéma n° 3. **Or il n'en est rien et l'on constate que l'image qui se forme après une acquisition de photons en nombre suffisant reproduit les figures d'interférences !**

La question qui vient immédiatement à l'esprit est de savoir pourquoi un photon, passant par la fente (1), par exemple, peut être sensible à un phénomène d'interférences, c'est à dire être influencé par la présence de la fente (2).

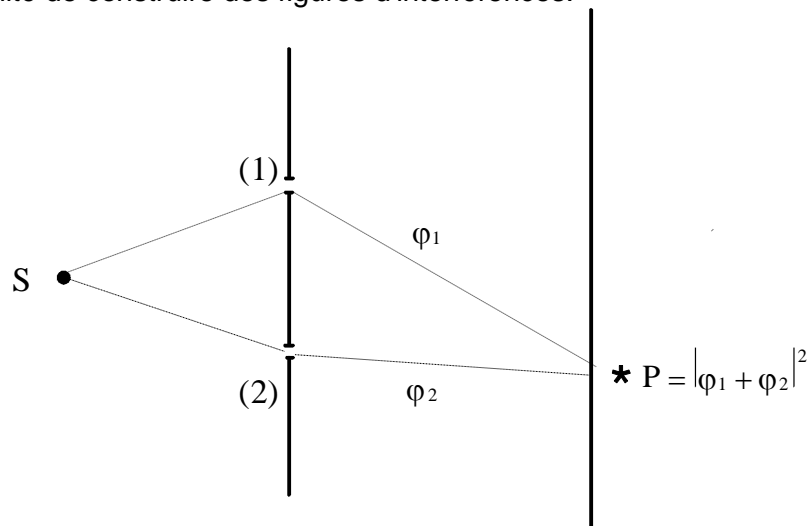
Un premier élément de réponse apparaît lorsque l'on essaye d'en savoir un peu plus sur la trajectoire individuelle des photons, en installant, par exemple, un dispositif permettant de savoir par quelle fente passent les photons. **Cette mesure est possible mais alors on n'obtient plus de figures d'interférences !**

L'aspect probabiliste de cette expérience est donc nécessaire pour que se produisent des phénomènes d'interférences : chaque photon passe par (1) **ou** par (2). Pour qu'un photon arrive en un point déterminé de l'écran, **il existe deux chemins possibles ( (1) et (2) ) que l'on affecte des amplitudes de probabilité  $\varphi_1$  et  $\varphi_2$  qui sont représenté par des**

**nombres complexes** :  $\varphi = r e^{i\theta}$ , la probabilité elle même étant le carré de l'amplitude :

$$P(1) = \varphi_1^* \cdot \varphi_1 = \varphi_1^2.$$

Si l'on postule que l'amplitude totale de la transition du photon depuis la source vers un point de l'écran est la somme des amplitudes de tous les chemins possibles, on retrouve alors la possibilité de construire des figures d'interférences.



Dans le cas précis du photon, l'amplitude de probabilité peut être prise égale à l'onde électromagnétique calculée en optique ondulatoire, à un facteur de normalisation près. Elle ne représente pas une onde électromagnétique mais plutôt une onde *guidant* (point de vue de De Broglie) le comportement du photon, ce dernier étant lui même le quantum du champ électromagnétique.

Cette approche devient d'autant plus intéressante lorsque l'on constate que cette expérience d'interférences d'amplitude de transition est réalisable avec des corpuscules matériels tels que électrons, neutrons, protons etc....: **la matière possède bel et bien un comportement ondulatoire dont l'origine profonde est le caractère probabiliste de la nature lorsqu'on la considère à des dimensions microscopiques**

Nous avons vu que ce comportement ondulatoire de la matière peut être formalisé à l'aide d'outils, les amplitudes de probabilité, construit mathématiquement comme des ondes "classiques".

Ces amplitudes de probabilité sont aussi appelées fonction d'onde, ou onde de matière. voire parfois (en France) onde de De Broglie

Leur contenu probabiliste n'empêche pas ces ondes d'obéir à des lois déterministes dont la première est, sur le plan historique, la fameuse équation de Schrödinger.

Pour terminer cette discussion il est nécessaire de revenir sur l'assertion : "le photon passe par (1) ou par (2)". Dans la conception quantique, cette assertion n'a pas de sens, ou si l'on préfère, il est inutile de se poser la question. Seule une mesure permet de savoir par où passe le photon mais alors, ainsi que l'on a vu précédemment, les amplitudes de probabilités sont affectées par la mesure et la situation expérimentale n'est plus la même. En mécanique quantique, seul le résultat d'une mesure physique peut avoir un sens (on parle alors "d'observable").

## .CHAP. 3 L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

### 1 ÉTABLISSEMENT DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

Nous allons retrouver cette équation par analogie en considérant d'une part l'équation d'onde électromagnétique et d'autre part la description corpusculaire de la lumière.

Une onde électromagnétique plane monochromatique s'écrit:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t) = \psi_0 \exp i\left(\frac{2\pi}{\lambda} \vec{u} \cdot \vec{r} - 2\pi \nu t\right)$$

Or la quantification de la lumière revient à écrire:  $p = \frac{h}{\lambda}$  et  $E = h\nu \Rightarrow$

$$(1) \quad \psi = \psi_0 \exp i\left(\frac{\vec{p}}{\hbar} \cdot \vec{r} - \frac{E}{\hbar} t\right) \quad \text{avec } \hbar = \frac{h}{2\pi}.$$

Considérons maintenant l'équation d'onde électromagnétique classique:

$$(2) \quad \Delta\psi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \Leftrightarrow \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

La dérivation de l'équation (1) par x donne:

$$(3) \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{ip_x}{\hbar} \psi \Leftrightarrow -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi$$

En dérivant une seconde fois on obtient:  $\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -p_x^2 \psi$

De même en dérivant (1) par rapport au temps on obtient:

$$(4) \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi$$

et en dérivant une seconde fois:  $\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = -E^2 \psi$

En remplaçant ces expressions dans l'équation (2) on obtient:

$$\frac{E^2}{c^2} = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \Leftrightarrow E^2 = p^2 c^2$$

On retrouve ici l'expression de l'énergie pour un photon  $E = pc$ .

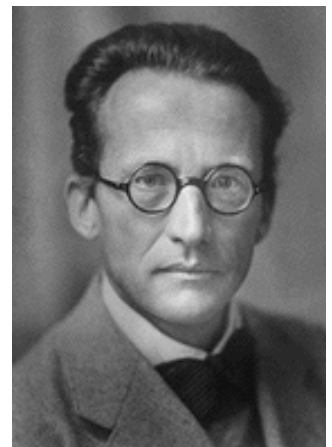
L'équation de Schrödinger va s'obtenir en partant de l'expression de l'énergie d'une particule

matérielle libre non relativiste  $E = \frac{p^2}{2m}$  et en réécrivant celle-ci en utilisant la notion

d'opérateurs mathématiques (expressions (3) et (4)):

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$



$E = \frac{p^2}{2m}$  s'écrit alors  $\hat{E} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ . En appliquant ces opérateurs à une fonction d'ondes  $\psi$  on

obtient:  $\hat{E} \cdot \psi = \frac{\hat{p}^2 \cdot \psi}{2m} \Leftrightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi}$

cette équation est l'équation de Schrödinger dépendant du temps pour une particule libre non relativiste.

On peut généraliser cette équation lorsque la particule est soumise à un potentiel scalaire

$V(x, y, z) :$   $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(x, y, z) \cdot \psi$

Il est possible aussi de considérer l'expression relativiste de l'énergie  $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$  dont l'utilisation aboutit à une formulation plus élaborée dite *équation de Dirac* à l'origine de la découverte théorique du spin et des antiparticules.

De façon générale l'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi}$$

$\hat{H}$  étant l'opérateur formé à partir de l'expression de l'énergie totale de la particule, appelé opérateur hamiltonien.

$\hat{H}$

Remarque: l'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles qui est linéaire. Cela signifie que si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont des solutions, toute combinaison linéaire  $\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2$  est aussi une solution de cette équation. Tout comme pour l'électromagnétisme classique, le principe de superposition s'applique. C'est, comme nous l'avons vu avec les fentes d'Young, ce qui permet d'expliquer l'existence de phénomènes d'interférences pour les particules. De plus cette linéarité permet d'utiliser le formalisme des espaces hermitiens (espaces vectoriels sur le corps des complexes) dont les vecteurs sont les fonctions d'ondes elles-mêmes.

## 2 EQUATION DE SCHRÖDINGER INDÉPENDANTE DU TEMPS. NOTION DE VALEUR PROPRE

Un domaine privilégié de la physique est l'étude des systèmes isolés; Nous savons que pour des tels systèmes l'énergie se conserve en fonction du temps. Cela se traduit par le fait que l'opérateur  $\hat{H}$  est indépendant du temps. on montre alors que les solutions de l'équation de Schrödinger peuvent se mettre sous la forme  $\psi(r, t) = \varphi(r) \chi(t)$  (séparations des variables).

On peut donc écrire:  $i\hbar \left( \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} \right) \varphi(r) = \hat{H} [ \varphi(r) \chi(t) ]$

L'opérateur  $\hat{H}$  étant indépendant du temps il n'agit pas sur  $\chi(t)$  et l'équation peut se mettre sous la forme :  $i\hbar \left( \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} \right) \frac{1}{\chi(t)} = \frac{\hat{H} \varphi(r)}{\varphi(r)}$

Le terme de gauche ne dépend que du temps alors que le terme de droite ne dépend que des variables d'espaces. L'égalité de ces deux termes implique qu'ils ne peuvent qu'être égaux à une constante. On peut montrer que pour un système isolé cette constante est l'énergie totale du système:

$$i\hbar \left( \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} \right) \frac{1}{\chi(t)} = \frac{\hat{H}\varphi(r)}{\varphi(r)} = E \Leftrightarrow \begin{cases} i\hbar \left( \frac{\partial \chi(t)}{\partial t} \right) \frac{1}{\chi(t)} = E & (1) \\ \text{et} \\ \frac{\hat{H}\varphi(r)}{\varphi(r)} = E & (2) \end{cases}$$

$$(1) \Rightarrow \chi(t) = \chi(0) e^{i \frac{E}{\hbar} t}$$

$$(2) \Rightarrow \hat{H}\varphi(r) = E \cdot \varphi(r) \Leftrightarrow \varphi(r) \text{ est un vecteur propre de } \hat{H} \text{ pour la valeur propre } E$$

La solution complète s'écrit alors :  $\psi(r, t) = \psi(r, 0) e^{i \frac{E}{\hbar} t}$  avec  $\psi(r, 0) = \varphi(r)\chi(0)$

On voit donc que la résolution de l'équation de Schrödinger pour un système isolé consiste essentiellement à résoudre l'équation aux **valeurs propres** suivante qui est **l'équation de Schrödinger indépendante du temps (stationnaire)** :

$$\boxed{\hat{H}\varphi(r) = E \cdot \varphi(r)}$$

La résolution de cette équation dans de nombreuses applications de physiques nucléaires et atomiques où les phénomènes relativistes sont négligeables et où les systèmes peuvent être considérés comme isolés est relativement simple. Après avoir déterminé la forme de l'opérateur hamiltonien provenant de l'expression de l'énergie totale "classique"

$E = \frac{p^2}{2m} + V(x, y, z)$ , on peut écrire l'équation de Schrödinger indépendante du temps:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + v(x, y, z) \cdot \varphi = E \cdot \varphi$$

Cette équation se simplifie dans beaucoup de cas en utilisant les symétries du système (ex: potentiel à symétrie sphérique pour l'électron dans le potentiel électromagnétique du noyau). Supposons par exemple que le potentiel ne dépende que de  $x$ , l'équation s'écrit alors:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \cdot \varphi(x) &= E \cdot \varphi(x) \Leftrightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = (E - V(x)) \cdot \varphi(x) \Leftrightarrow \\ \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} &= -k^2 \varphi(x) \text{ avec } k^2 = \frac{2m(E - V(x))}{\hbar^2} \end{aligned}}$$

Les solutions générales de cette équation sont de la forme :  $\varphi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$

$k$  pouvant être réel ou imaginaire pur suivant le signe de  $E - V(x)$ . Les solutions particulières pour le système considéré s'obtiennent en utilisant les conditions aux limites et en postulant **la continuité de  $\varphi(x)$  et de sa dérivée**.

Ces conditions imposent en général des valeurs particulières discrètes pour  $E$ , valeurs qui sont donc les valeurs propres de l'équation. Les fonctions d'ondes sont alors parfaitement déterminées (voir exercices corrigés en fin de chapitre).

## .CHAP. 4 LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

### 1 L'ESPACE DE TRAVAIL. LE FORMALISME DE DIRAC

Nous avons vu que la forme linéaire de l'équation de Schrödinger permet d'utiliser le formalisme des espaces vectoriels sur le corps des complexes appelés espaces hermitiens. Les vecteurs de cet espace sont les fonctions d'ondes elles mêmes; Nous allons introduire ici la notation de Dirac et noter les vecteurs sous la forme  $|\varphi\rangle$  ( $\Leftrightarrow$  vecteur colonne) appelé "ket". Le vecteur transposé de ce vecteur ( $\Leftrightarrow$  vecteur ligne) appelé "bra" sera noté  $\langle\varphi|$ . Le produit scalaire de deux vecteurs  $|\varphi\rangle$  et  $|\psi\rangle$  s'écrit  $\langle\psi|\varphi\rangle$ , "braket" signifiant "crochet" en allemand.

Les opérateurs  $\hat{O}$  correspondant à des quantités physiques observables  $O$  peuvent être associés à des matrices hermitiques, c'est à dire des matrices égales à leur adjointe (conjuguée de la matrice transposée). Un opérateur transforme un vecteur en un autre vecteur:  $\hat{O}|\varphi\rangle = |\varphi'\rangle$ . On peut montrer que lorsque l'opérateur est hermitique, c'est à dire lié à une grandeur observable, les vecteurs propres de cet opérateur forment une base de l'espace des fonctions d'ondes  $\Leftrightarrow$  tout vecteur  $|\psi\rangle$  peut se mettre sous la forme  $|\psi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle$  où  $|u_i\rangle$  est le vecteur propre correspondant à la valeur propre  $\lambda_i$   
 $\Leftrightarrow \hat{O}|u_i\rangle = \lambda_i |u_i\rangle$ .

On montre de plus que les valeurs propres d'un opérateur hermitiques sont réelles et que deux vecteurs propres correspondants à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.





## 2 POSTULAT ET RÉSULTATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE.

### Postulat n° 1

L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant par la connaissance de son vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$ .

Rappelons que  $|\psi(t)\rangle$  représente une amplitude de probabilité. La norme de ce vecteur représente donc une probabilité. Dans la notation de Dirac l'expression  $\langle\psi|\psi\rangle$  est la probabilité intégrée sur tout l'espace, i.e.  $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \int \psi^*(r,t)\psi(r,t)dr = \iiint_{[-\infty;+\infty]} \psi^*\psi dxdydz$

$\psi(r,t)^*\psi(r,t)dr$  représente la probabilité de trouver la particule au point  $r$  à  $dr$  près à l'instant  $t$ . Pour des raisons physiques évidentes, la probabilité intégrée sur tout l'espace doit être égale à 1  $\Leftrightarrow \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$ .

### Postulat n° 2

On associe à toute grandeur physique  $O$  un opérateur hermitique  $\hat{O}$ , appelé observable, qui agit sur le vecteur d'état  $|\psi\rangle$  du système. Le résultat d'une mesure concernant  $O$  ne peut conduire qu'à une valeur propre de l'opérateur  $\hat{O}$ . Immédiatement après la mesure, le vecteur d'état est modifié: il est réduit à sa projection sur le sous-espace vectoriel propre associé à la valeur propre mesurée (réduction du paquet d'onde).

Considérons  $\{|u_i\rangle\}$  la base de vecteurs propres associés à l'opérateur  $\hat{O}$ . Considérons un système sur lequel nous voulons effectuer la mesure  $O$ . Tout ce que nous pouvons dire avant la mesure sur ce système est que son vecteur d'état est une combinaison des vecteurs propres  $|u_i\rangle$  :  $|\psi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle$

L'opération physique de la mesure correspond à l'opération mathématique  $\hat{O}|\psi\rangle$ .

$$\text{Or } \hat{O}|\psi\rangle = \hat{O}\sum_i a_i |u_i\rangle = \sum_i a_i \hat{O}|u_i\rangle = \sum_i a_i \lambda_i |u_i\rangle$$

Si l'on effectue le produit scalaire  $\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$  on trouve :

$$\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle = \sum_i a_i \langle u_i | a_i \lambda_i | u_i \rangle = \sum_i a_i^2 \lambda_i$$

Or le postulat nous dit que le résultat de la mesure conduit à obtenir une valeur propre de  $\hat{O}$ . Soit  $\lambda_k$  le résultat de cette mesure, on en tire alors les conclusions suivantes:

- nous comprenons mieux l'intérêt d'utiliser des opérateurs hermitiques dont les valeurs propres sont réelles et donc physiquement mesurables.
- après une mesure donnant  $\lambda_k$  comme résultat, nous savons alors que le système se trouve maintenant dans l'état  $|u_k\rangle$ , en effet le résultat d'une deuxième mesure de  $O$  doit donner le même résultat.
- **avant la mesure, nous ne pouvons pas prédire avec certitude le résultat de la mesure. L'expression  $\sum_i a_i^2 \lambda_i$  peut s'interpréter comme une moyenne probabiliste des**

**résultats : le résultat  $\lambda_k$  peut être prédit avec la probabilité  $a_k^2$ .**

- La valeur moyenne d'une observable  $\hat{O}$  sera notée  $\langle \hat{O} \rangle$  et l'on a :

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$$

nous voyons enfin que l'opération de mesure fait passer le système de l'état  $|\psi\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle$

à l'état  $|u_k\rangle$ . Cette "réduction du paquet d'onde" ne doit pas être considérée comme une simple vue de l'esprit mais correspond bel et bien à des phénomènes quantiques mesurables. Ceci pose en quelque ligne toute la problématique de l'interaction entre l'expérimentateur et le système quantique qui a conduit certains esprits (souvent puissants mais parfois fumeux) vers des théories anthropiques dont le credo essentiel est : "l'univers existe parce que je l'observe".

### Postulat n° 3

L'évolution au cours du temps du vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  est gouvernée par l'équation de Schrödinger dépendante du temps :  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$

On pourra aussi utiliser l'expression adjointe :  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}(t)$

### Postulat n°4

Pour obtenir l'expression de l'opérateur  $\hat{O}(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}, \hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$  associé à la quantité physique  $O(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ , il suffit de remplacer les opérateurs  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$  par :

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z. \quad (\text{multiplication scalaire})$$

et  $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$  par :

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{dérivation})$$

### 3 COMMUTATION D'OBSERVABLES.

On dit que deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent lorsque :

$$\hat{A} \hat{B} |\psi\rangle = \hat{B} \hat{A} |\psi\rangle \quad \forall |\psi\rangle \Leftrightarrow \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} = 0$$

Conséquence :

**Lorsque deux observables commutent, on peut observer simultanément les résultats des deux mesures.**

Démonstration:

Nous allons tout d'abord montrer que lorsque  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  commutent, ils possèdent les mêmes vecteurs propres:

$$\text{Soit } |\varphi\rangle \text{ un vecteur propre de } \hat{A} \Leftrightarrow \exists a \mid \hat{A} |\varphi\rangle = a |\varphi\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{B} \hat{A} |\varphi\rangle = \hat{B} (\hat{A} |\varphi\rangle) = \hat{B} (a |\varphi\rangle) = a (\hat{B} |\varphi\rangle)$$

$$\text{Or } \hat{B} \hat{A} |\varphi\rangle = \hat{A} \hat{B} |\varphi\rangle = \hat{A} (\hat{B} |\varphi\rangle) \Rightarrow \hat{A} (\hat{B} |\varphi\rangle) = a (\hat{B} |\varphi\rangle)$$

$\hat{B} |\varphi\rangle$  est donc un vecteur propre pour la valeur propre  $a$ . Si l'on suppose que les sous-espaces vectoriels propres sont de dimension 1 (non dégénéré), cela signifie que  $\hat{B} |\varphi\rangle$  est colinéaire à  $|\varphi\rangle \Leftrightarrow \exists b \mid \hat{B} |\varphi\rangle = b |\varphi\rangle$  ce qui revient à dire que  $|\varphi\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{B}$  pour la valeur propre  $b$ . Dans le cas où les sous-espaces propres sont dégénérés ( $\text{Dim} > 1$ ) la démonstration est plus longue pour un résultat identique.  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  possèdent donc bien la même base de vecteurs propres avec toutefois des spectres de valeurs propres différents.

Considérons maintenant un système quantique dans un état propre  $|\varphi\rangle$  de  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  :

$\hat{B} |\varphi\rangle = b |\varphi\rangle \Leftrightarrow$  le résultat d'une mesure en  $B$  est  $b$ . Après cette mesure, l'état du système est toujours  $|\varphi\rangle$ . Une mesure effectuée en  $A$  sur ce système donnera la valeur  $a$ . Le raisonnement est identique si l'on inverse l'ordre des opérations. En conséquence une mesure en  $A$  n'affecte pas le résultat d'une mesure en  $B$ . En ce sens les mesures sont indépendantes et peuvent par principe être effectuées de façons simultanées.

Ceci n'est plus le cas lorsque les observables ne sont pas commutables.

Donnons à titre d'exemple deux opérateurs qui ne commutent pas : les opérateurs position  $\hat{X}$  et impulsion  $\hat{p}_x$ .

$$\begin{aligned} \hat{X} |\varphi\rangle &= x |\varphi\rangle & \hat{X} \hat{p}_x |\varphi\rangle &= x \cdot \frac{-i\hbar \partial}{\partial x} |\varphi\rangle = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} |\varphi\rangle \\ \hat{p}_x |\varphi\rangle &= -\frac{i\hbar \partial}{\partial x} |\varphi\rangle & \Rightarrow \text{et} & \\ \hat{p}_x \hat{X} |\varphi\rangle &= \frac{-i\hbar \partial}{\partial x} (x |\varphi\rangle) & &= -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} |\varphi\rangle - i\hbar |\varphi\rangle \\ & & \Rightarrow \hat{X} \hat{p}_x |\varphi\rangle &\neq \hat{p}_x \hat{X} |\varphi\rangle \end{aligned}$$

De plus on trouve que la quantité:

$$\hat{X} \hat{p}_x |\varphi\rangle - \hat{p}_x \hat{X} |\varphi\rangle = (\hat{X} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{X}) |\varphi\rangle = i\hbar |\varphi\rangle \quad \forall |\varphi\rangle$$

$$\text{donc} \quad \hat{X} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{X} = i\hbar$$

On note de façon générale  $[A; B]$  la quantité  $AB - BA$  appelé commutateur de A et B. Nous avons donc  $[\hat{X}, \hat{p}_x] = i\hbar$ . Nous verrons les conséquences de ceci sous une autre forme avec les inégalités d'Heisenberg. Quoi qu'il en soit, nous pouvons déjà dire qu'il est impossible de déterminer simultanément la position et l'impulsion d'une particule.

L'un des objectifs fondamentaux de la mécanique quantique appliquée à l'étude d'un système (atome, noyau) sera de définir un ensemble d'observables commutables entre eux afin d'attribuer à ce système un ensemble de grandeurs physiques le définissant de façon univoque, ces grandeurs devant pouvoir être mesurées indépendamment les unes des autres sans interférer. Ces grandeurs sont souvent appelées "les bons nombres quantiques".

## 4 THÉORÈME D'ERHENFEST

Nous allons nous intéresser à la variation au cours du temps d'une quantité mesurable  $O$ . Ceci rejoint le souci constant en physique de déterminer des grandeurs qui soient conservées au cours du temps lorsque des systèmes isolés subissent des évolutions internes.

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \Leftrightarrow \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \frac{d}{dt} (\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle) = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi | \right) \hat{O} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{O} \left( \frac{d}{dt} | \psi \rangle \right)$$

En utilisant l'équation de Schrödinger et son adjointe, on obtient :

$$\frac{d \langle \hat{O}(t) \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{O}(t)}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}(t), \hat{H}(t)]$$

Lorsque  $\hat{O}$  ne dépend pas explicitement du temps (mais pouvant dépendre de variables elles-mêmes dépendantes du temps), on obtient alors l'expression:

$$\frac{d \langle \hat{O} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}, \hat{H}(t)]$$

Si  $\hat{O}$  commute avec  $\hat{H}$ , alors la valeur moyenne de  $O$  est une grandeur conservée au cours du temps.

L'application de cette formule aux observables  $\hat{X}$  et  $\hat{p}_x$  avec un opérateur hamiltonien

"classique"  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{X})$  permet de démontrer le théorème d'Ehrenfest:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{X} \rangle &= \frac{1}{m} \langle \hat{p}_x \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle &= -\langle \text{grad } V \rangle \end{aligned}$$

Ces deux équations ont une forme analogue aux lois de la mécanique classique du point et permettent de retrouver les lois classiques lorsque les dimensions du système deviennent suffisamment grande. Il faut noter que cette continuité entre la mécanique quantique et classique est posée pour garantir la cohérence et la validité des lois quantique (principe de correspondance).



## 5 INÉGALITÉS D'HEISENBERG ET INDÉTERMINATION

L'algèbre des espaces hermitiens permet de démontrer le résultat suivant:

Soient deux observables  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  qui ne commutent pas ( $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ), on peut alors définir une troisième observable  $\hat{C}$  par  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ . Si l'on reprend la définition classique de l'écart-type  $\Delta A$  d'une grandeur  $A$  :  $(\Delta A)^2 = \langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle$ , on peut alors montrer que :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle \hat{C} \rangle|}{2}$$

Exemple: nous avons vu que  $[\hat{X}, \hat{p}_x] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Plus la précision sur la position sera grande, plus l'indétermination sur l'impulsion sera élevée et réciproquement. Il faut noter que cette relation d'indétermination ne représente pas seulement une limite à la précision des mesures mais bien plus traduit un "flou" fondamental dans le monde des particules lié intrinsèquement au caractère ondulatoire de la matière, une indétermination fondamentale. Qui permet entre autres aux particules de se lier.

Il existe une autre inégalité d'Heisenberg fondamentale qui est:  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$

Cette inégalité doit se lire de la façon suivante:

La mesure de l'énergie  $E$  d'un système est entachée d'une indétermination  $\Delta E$  liée à la durée de la mesure  $\Delta t$ , ces deux grandeurs obéissant à la relation ci-dessus. Nous utiliserons cette relation notamment dans le cas de système ayant une durée de vie  $\tau$  limitée, auquel cas le temps de mesure  $\Delta t$  étant de fait limité par le temps de vie, l'énergie du système n'est fondamentalement définie qu'à  $\Delta E$  près, indétermination appelée *largeur naturelle*. Notons que cette inégalité ne se démontre pas tout à fait de la même façon que la précédente. En effet le temps n'est pas une observable, ce qui lui confère encore actuellement un caractère quelque peu mystérieux (mystère qui s'épaissit encore lorsque l'on réfléchit sur la "flèche du temps")

### Remarque importante

Les indéterminations évoquées sont la plupart du temps appelées à tort « incertitudes ». Or l'incertitude est un concept qui représente un manque de connaissance sur une grandeur parfaitement déterminée, ce qui se rencontre dans le cadre de la mesure classique. Et l'incertitude n'existe que dans notre esprit, et pas dans le monde réel. Alors qu'inversement les indéterminations sont des états particuliers du monde réel. Le « principe d'incertitude d'Heisenberg » doit être appelé principe d'indétermination d'Heisenberg (*Alain Aspect*)



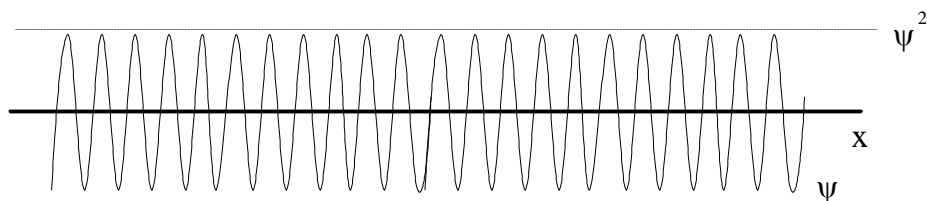
## 6 PAQUETS D'ONDES. VITESSE DE PHASE. VITESSE DE GROUPE

Reprenons l'expression d'une onde monochromatique plane pour une particule matérielle :

$$\psi(x, t) = a e^{i(k \cdot x - \omega t)} \quad \text{avec} \quad E = \hbar \omega \quad \text{et} \quad p = \hbar k$$

Cette représentation pose problème car, en effet  $\psi^* \psi = a^2 \quad \forall x \text{ et } t \Rightarrow \langle \psi | \psi \rangle = \infty$

La fonction d'onde n'est pas de carré sommable. Sur un plan plus physique, l'onde monochromatique représente une particule "présente" dans tout l'espace, donc difficilement compatible avec la représentation d'un corpuscule relativement localisée dans cet espace.  $\psi$  :



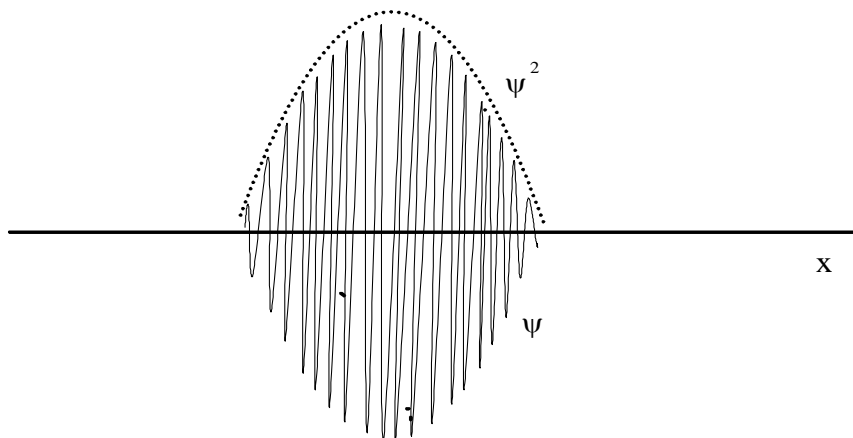
On retrouve ici de façon imagée l'une des conséquences des inégalités d'Heisenberg, puisque nous avons ici  $\Delta p = 0 \Rightarrow \Delta x = \infty$

L'onde monochromatique pour une particule matérielle pose un autre problème, celui de la représentation de la vitesse de la particule. La seule vitesse que l'on puisse attribuer à une onde de ce type est la vitesse de phase (i.e. la vitesse de déplacement d'un point lié à une

$$\text{phase constante}) : v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}}{p} \geq c$$

Il est donc nécessaire de trouver une représentation ondulatoire qui permette une certaine localisation de la particule et la possibilité de lui attribuer une vitesse quelconque, voire nulle (mais de toute façon inférieure à la vitesse de la lumière)

Ceci est possible grâce à la représentation par paquet d'ondes:



Cette construction rejoint le formalisme de la théorie du signal et en utilise tout l'arsenal mathématique (série de Fourier, transformée de Fourier etc...) . Nous n'entrerons pas dans ce formalisme mais simplement l'illustrer avec un exemple simple :

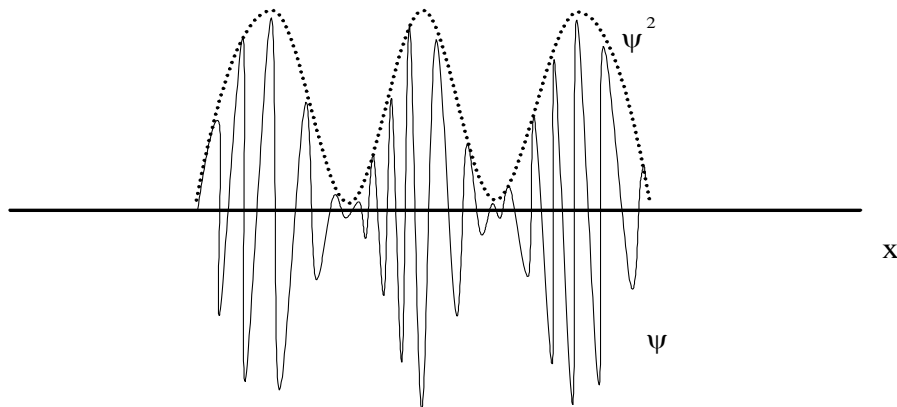


Considérons l'onde résultante de la somme de deux ondes monochromatiques planes ayant des nombres d'ondes et des pulsations voisins:

$$\begin{cases} \psi_1(x, t) = a e^{i(k \cdot x - \omega t)} = a e^{i(k \cdot x - \omega t)} \\ \psi_2(x, t) = a e^{i((k+\Delta k) \cdot x - (\omega+\Delta\omega) t)} \end{cases} \Rightarrow \psi(x, t) = \psi_1(x, t) + \psi_2(x, t) = a e^{i(k \cdot x - \omega t)} (1 + e^{i(\Delta k x - \Delta\omega t)})$$

La densité de probabilité n'est plus constante en tout point mais égale à :

$$|\psi(x, t)|^2 = 4a^2 \cos^2\left(\frac{\Delta k}{2} x - \frac{\Delta\omega}{2} t\right)$$



Nous voyons se dessiner ici une ébauche de paquet d'ondes . La vitesse de déplacement de l'enveloppe est appelé vitesse de groupe et vaut ici :  $v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k}$

La définition exacte de la vitesse de groupe est :

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

Dans le cas d'une particule libre, nous pouvons écrire de façon classique:

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \omega = \frac{\hbar k^2}{2m} \Rightarrow v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$$

La vitesse de groupe, construite à partir d'un modèle ondulatoire, est donc bien représentative de la vitesse d'une particule matérielle. La complémentarité onde-corpuscule montre donc ici à nouveau tout son sens et toute sa cohérence. Nous retrouvons de plus la puissance et l'intérêt du principe de superposition des amplitudes de probabilité évoquée dans le chapitre sur les fentes d'Young.

Remarque:

Les inégalités d'Heisenberg sont implicites dans ce formalisme. En effet on montre dans le domaine classique de la théorie du signal que pour un train d'onde quelconque  $x$  et  $k$  (nombre d'onde) sont transformées de Fourier l'une de l'autre (on parle alors de variables conjuguées). Ceci implique alors l'inégalité purement classique  $\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$ .

Sachant qu'en mécanique quantique  $p = \hbar k$  on retrouve alors la première inégalité d'Heisenberg dont la nature profondément ondulatoire ne doit pas être oubliée.

## .CHAP. 5 LE MOMENT CINÉTIQUE EN MÉCANIQUE QUANTIQUE

### 1 MOMENT CINÉTIQUE EN PHYSIQUE CLASSIQUE

Le moment cinétique est, déjà en physique classique, une grandeur fondamentale puisque c'est avec l'énergie et l'impulsion une grandeur qui se conserve pour un système isolé. Nous verrons par la suite que la prise en considération du moment cinétique en mécanique quantique (i.e. la quantification du moment cinétique) permet d'attribuer à un système une série de nombres entiers ou demi-entiers définissant l'essentiel des propriétés du système et permettant de classer ("règles de sélections") la nature des transitions subies par ce système notamment lors de désintégrations.

L'intérêt d'introduire le moment cinétique en mécanique quantique se comprend d'autant mieux quand on se rappelle que toute particule chargée dotée d'un moment cinétique  $\vec{I}$  possède alors un moment magnétique  $\vec{M} = g \frac{e\hbar}{4m} \vec{I}$  (g étant un facteur dépendant de la

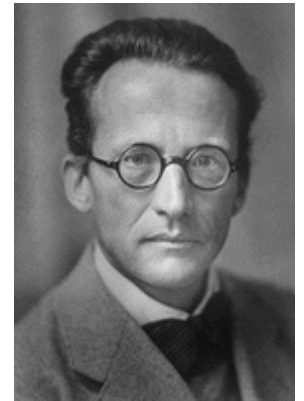
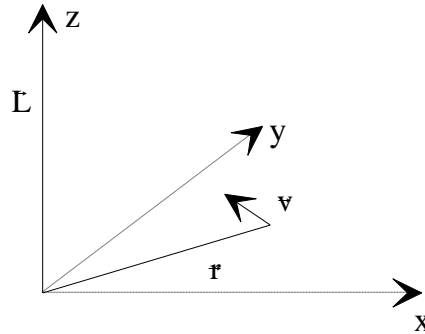
nature de la particule). S'il existe un champ magnétique  $\vec{B}$ , cela introduit alors une énergie potentielle magnétique  $H_B = -\vec{M} \cdot \vec{B}$ . Ce potentiel modifie (souvent très légèrement) alors le hamiltonien de la particule et par conséquent les solutions de l'équation de Schrödinger ("structure fine").

Nota: le champ magnétique  $\vec{B}$  lui-même peut provenir d'une particule chargée effectuant un mouvement de rotation.

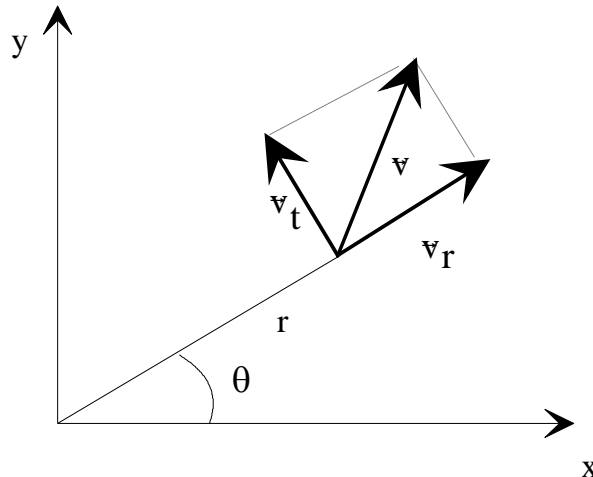
## 2 MOMENT CINÉTIQUE ET ÉQUATION DE SCHRÖDINGER.

Nous allons à nouveau partir de considérations classiques pour voir que le moment cinétique peut s'introduire de façon formelle assez naturellement moyennant un simple changement de variables.

Le moment cinétique se définit pour une particule de masse  $m$  et de vitesse  $\vec{v}$  située au point  $M$  relativement à un point  $O$  par:  $\vec{L} = \vec{OM} \wedge m\vec{v} = \vec{r} \wedge \vec{p} \cdot \sqrt{2}\hbar$



Exprimons maintenant l'énergie d'une particule soumise à un potentiel central  $V(r, \theta)$  ayant la symétrie sphérique.



L'expression classique de l'énergie est alors :

$$E = \frac{1}{2} mv^2 + V(r, \theta) = \frac{1}{2} m(v_r^2 + v_t^2) + V(r, \theta) = \frac{1}{2} mv_r^2 + \frac{1}{2} mv_t^2 + V(r, \theta)$$

$$\text{or } \|\vec{L}\| = \|\vec{r} \wedge m\vec{v}\| = mrv_t \Rightarrow \frac{1}{2} mv_t^2 = \frac{L^2}{2mr^2} \Rightarrow E = \frac{1}{2} mv_r^2 + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r, \theta)$$

On montre que pour un tel système les fonctions d'ondes peuvent s'écrire:

$$\psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi)$$

En posant  $R(r) = \frac{u(r)}{r}$  on montre que la résolution de l'équation de Schrödinger

indépendante du temps se ramène à l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[ \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] u = E \cdot u$$

Cette équation est formellement identique à une équation de Schrödinger et l'on voit que le moment cinétique joue ici le rôle d'un potentiel supplémentaire, appelé potentiel centrifuge. Nous n'irons pas plus loin dans cet aspect des choses et nous allons aborder maintenant le moment cinétique au travers des propriétés des opérateurs hermitiques.

### 3 LES OPÉRATEURS MOMENT CINÉTIQUE.

Partons à nouveau de la définition classique du moment cinétique:  $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$

$$\vec{r} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}, \quad \vec{p} = \begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{bmatrix} \Rightarrow \vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p} = \begin{bmatrix} yp_z - zp_y \\ zp_x - xp_z \\ xp_y - yp_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_x \\ L_y \\ L_z \end{bmatrix}$$

A chaque composante  $L_x, L_y, L_z$  on peut associer un opérateur  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ .

Par exemple:

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left[ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right]$$

On montre alors simplement que  $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$  ne commutent pas entre eux:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z$$

Par contre si l'on définit l'observable  $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$  alors on a  $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$ . On utilisera alors deux observables qui commutent, par exemple  $\hat{L}^2$  (norme du moment cinétique) et  $\hat{L}_z$  (projection sur l'axe z) pour étudier l'état d'un système. Nous savons alors que  $\hat{L}^2$  et  $\hat{L}_z$  ont des vecteurs propres communs.

Soit  $|\varphi\rangle$  l'un de ces vecteurs propres  $\Rightarrow \exists a$  et  $b$  réels /  $\hat{L}^2|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$  et  $\hat{L}_z|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle$

Nous savons que  $a$  et  $b$  sont réels et homogène en dimension: au carré d'une action pour  $a$  et à une action pour  $b$ . Nous pouvons donc écrire:  $a = \alpha\hbar^2$  et  $b = \beta\hbar$ . Pour des raisons pratiques d'algèbre nous écrirons  $\alpha = l(l+1)$  et  $\beta = m$ .

Le vecteur propre  $|\varphi\rangle$  sera noté alors  $|l, m\rangle$  avec 
$$\begin{cases} \hat{L}^2|l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l, m\rangle \\ \hat{L}_z|l, m\rangle = m\hbar|l, m\rangle \end{cases}$$

Les propriétés purement algébriques des espaces hermites permettent de montrer que:

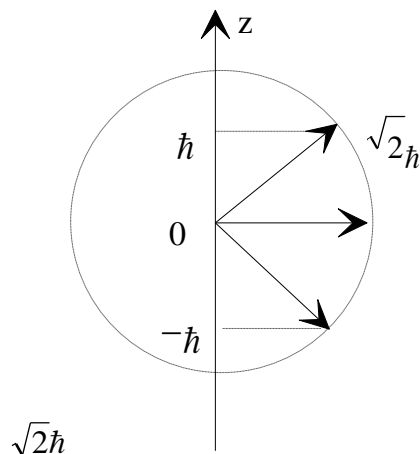
-  $l$  et  $m$  ne peuvent prendre que des valeurs entières ou demi-entières.

-  $l$  ne peut être que positif.

-  $m$  est compris entre  $-l$  et  $+l$  et varie par saut d'une unité.

Pour une valeur de  $l$  donné, il existe donc  $2l + 1$  couple  $(l, m)$  possibles ("dégénérescence").

Illustration géométrique:  $l = 1 \Rightarrow |L| = \sqrt{\langle \hat{L}^2 \rangle} = \sqrt{2}\hbar$  et  $m = -1, 0$  ou  $1$



Le vecteur moment cinétique peut donc être dans trois états différents. Ces trois états correspondent à trois états possibles pour le système. Un état sera donc parfaitement défini par la donnée du couple  $(l, m)$ . Notons que lorsque la projection sur un axe  $z$  est définie, on ne peut rien dire sur la projection en  $x$  et en  $y$ . La position spatiale de  $\vec{L}$  est indéterminée sur un cône de révolution autour de  $z$ . On retrouve ici la notion d'indétermination, de "floue", inhérente à la mécanique quantique.

Il faut enfin souligner que le choix de l'axe  $z$  est purement arbitraire, toute projection sur un axe quelconque (et un axe à la fois) ne peut aboutir qu'aux mêmes valeurs possibles de  $m$ .

#### 4 ADDITION DE MOMENT CINÉTIQUE.

Supposons que pour un système, le moment cinétique total soit la somme de deux moments cinétiques particuliers  $\vec{L}_1$  et  $\vec{L}_2$ . ce pourrait être par exemple la somme du moment cinétique orbital d'une particule autour d'un centre attracteur et d'un moment cinétique de révolution propre (spin) de la particule sur elle même. La quantité qui se conserve au cours du temps est le moment cinétique total résultant  $\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$ . Il est alors utile de pouvoir calculer les valeurs propres de  $\hat{L}^2$  et  $\hat{L}_z$  (qui seront les "bons nombres quantiques) connaissant les valeurs propres de  $\hat{L}_1$  et  $\hat{L}_2$ .

Notons  $|l_1, m_1\rangle$  les vecteurs propres de  $\hat{L}_1$  et  $|l_2, m_2\rangle$  les vecteurs propres de  $\hat{L}_2$ . On montre alors que les vecteurs propres de  $\hat{L}$  sont de la forme  $|l, m\rangle$  avec:

$$\left\{ \begin{array}{l} |l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2 \\ \text{et} \\ m = m_1 + m_2 \end{array} \right.$$

## 5 NOTION DE SPIN INTRINSÈQUE.

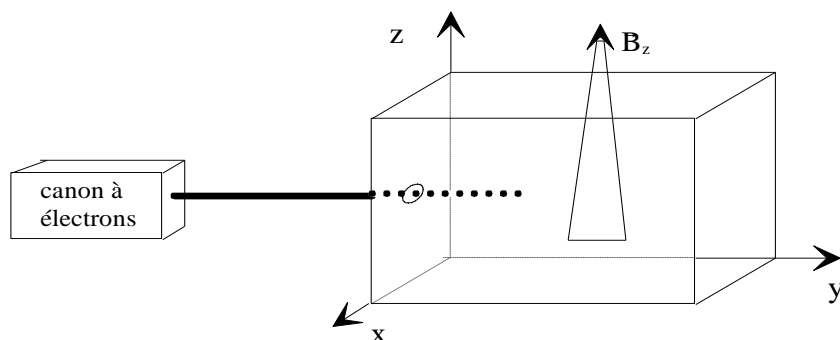
La physique des particules fondamentales montre que l'on peut attribuer à la plupart des particules, même supposée ponctuelle comme l'électron ou sans masse comme le photon, une quantité homogène à un moment cinétique dont l'image purement classique correspondrait à une particule tournant sur elle-même. Cette quantité appelée spin intrinsèque et souvent notée  $\vec{s}$  ou  $\vec{\sigma}$  se traite comme un moment cinétique à part entière (nous n'entrerons pas ici dans les spécificités de l'algèbre "spinorielle") et contribue au moment cinétique total du système.

La particularité essentielle du spin est de pouvoir prendre des valeurs demi-entière  $\Leftrightarrow \hat{s}^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle$  avec  $s$  entier ou demi-entier alors que pour un moment cinétique orbital,  $l$  ne peut prendre que des valeurs entières. L'électron, le neutron et le proton entre autres possèdent un spin intrinsèque  $s = \frac{1}{2}$ . Nous noterons que pour cette

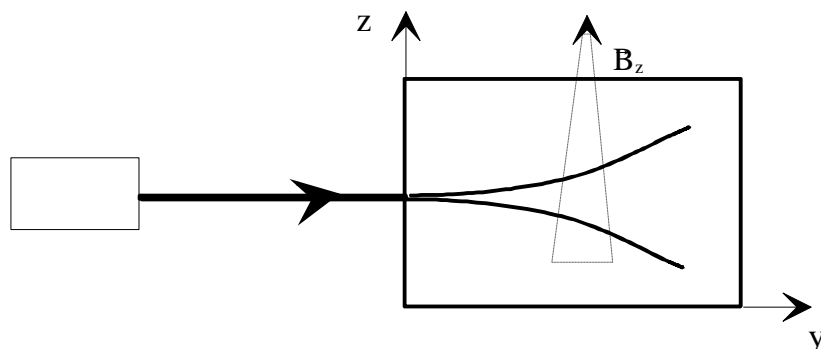
valeur de spin la projection sur un axe ne peut prendre que les valeurs  $+\frac{1}{2}$  ou  $-\frac{1}{2}$ .

La notion de spin a été introduite de la première fois par Paul Dirac en 1928 sur des considérations purement théoriques par ailleurs relativement ardues. Il existe cependant une approche expérimentale antérieure qui permet de mieux "visualiser" cette réalité du monde des particules. C'est l'expérience de Stern et Gerlach (1922) dont nous allons donner une représentation simplifiée.

Considérons un faisceau d'électrons monocinétiques pénétrant dans une cavité où règne un champ magnétique orienté suivant l'axe  $z$  et diminuant d'intensité en fonction de  $z$  :



Nous savons que les électrons étant des particules chargées, ils vont subir une déviation circulaire dans le plan  $(x,y)$  due à la force de Lorentz ( $\vec{f} = e \vec{v} \wedge \vec{B}_z$ ). Nous ne nous intéressons pas ici à ce phénomène purement classique. On constate par contre que le faisceau d'électrons se divise symétriquement en deux faisceaux dans le plan  $(y,z)$ .



Ce résultat ne peut s'interpréter dans le cadre de la physique classique mais se démontre très simplement si l'on admet que les électrons possèdent bien un moment cinétique intrinsèque  $s = \frac{1}{2}$ . La projection de  $\vec{s}$  sur l'axe  $z$  donne donc deux possibilités :

$m_s = +\frac{1}{2}$  ou  $m_s = -\frac{1}{2}$ . A chacune de ces projections de spin on peut associer un moment

magnétique de valeur algébrique  $M_s^+ = +\frac{1}{2} \frac{e\hbar}{m}$  et  $M_s^- = -\frac{1}{2} \frac{e\hbar}{m}$  sur l'axe  $z$ . A chacun de ces

moments magnétiques on peut ensuite associer une énergie  $E = -M \cdot B_z$ . Or  $B$  étant variable cette énergie définit une énergie potentielle à gradient non nul induisant une force sur l'électron dans le sens des  $z$  croissants ou décroissants suivant le signe de  $m_s$ . La répartition statistique des projections de spin étant aléatoire (faisceau non polarisé) le faisceau se répartit donc suivant deux faisceaux. Les deux faisceaux ainsi préparés correspondent eux à des faisceaux dits polarisés. Cette polarisation est analogue à la polarisation de la lumière et met à nouveau en évidence la complémentarité onde-corpuscule.



## 6 NOTIONS DE STATISTIQUE: BOSONS ET FERMIONS

Ces notions ont déjà été évoquées dans le chapitre sur les particules fondamentales. Nous avons vu effectivement que les particules sont classées en deux familles principales, les fermions (électrons, protons, neutrons ; statistique de Fermi-Dirac) qui obéissent au principe d'exclusion de Pauli, et les bosons (photon, pions ; statistique de Bose-Einstein) qui n'obéissent pas à ce principe qui s'énonce tout simplement: "deux fermions ne peuvent occuper le même état quantique".

Précisons que cela signifie que deux fermions identiques ne peuvent pas se trouver au même instant au même endroit avec des états d'énergie et de spin identiques. Ceci explique entre autres la non-interpénétrabilité de la matière et s'illustre clairement par le remplissage des orbitales électroniques de l'atome.

Le formalisme quantique, au travers des fonctions d'ondes, est capable de traduire assez simplement le comportement fermionique ou bosonique:

Considérons un système de  $N$  particules identiques indiscernables et soit  $|\psi(1,2,...,i,...,j,...,N)\rangle$  la fonction d'onde du système. Appliquons à ce système l'opérateur  $\hat{P}_{ij}$ , opérateur de transmutation tel que  $\hat{P}_{ij}|\psi(1,2,...,i,...,j,...,N)\rangle = |\psi(1,2,...,j,...,i,...,N)\rangle$

On constate alors que  $\hat{P}_{ij}^2|\psi(1,2,...,i,...,j,...,N)\rangle = |\psi(1,2,...,i,...,j,...,N)\rangle$

$\hat{P}_{ij}^2$  est donc l'opérateur identité. De plus si les particules sont identiques et indiscernables

l'expression de  $\hat{H}$  ne varie pas par commutation de 2 particules  $\Rightarrow [\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0 \quad \forall i, j$

On peut donc trouver des vecteurs propres commun à  $\hat{P}_{ij}$  et  $\hat{H}$ . Soit  $|\psi\rangle$  un tel vecteur propre:

$$\hat{P}_{ij}|\psi\rangle = p|\psi\rangle \Rightarrow \hat{P}_{ij}^2|\psi\rangle = p^2|\psi\rangle = |\psi\rangle \Rightarrow p^2 = 1 \Rightarrow p = \pm 1$$

$p = +1 \Rightarrow |\psi\rangle$  fonction symétrique

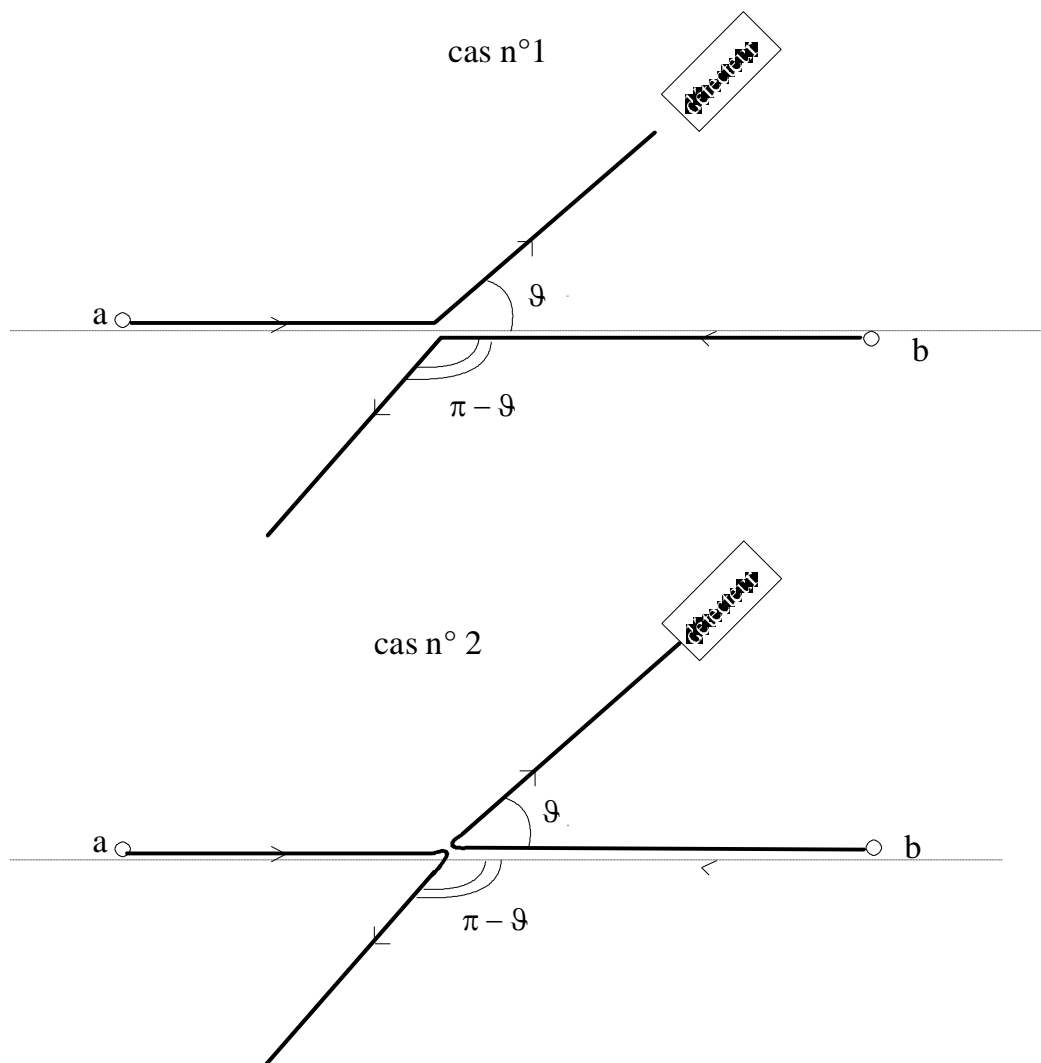
$p = -1 \Rightarrow |\psi\rangle$  fonction antisymétrique

Rappelons que  $|\psi\rangle$  représente ici les solutions physiquement viables du système puisque solutions de l'équation de Schrödinger. Les fonctions d'ondes des systèmes sont donc toujours soit symétriques soit antisymétriques.

On montre alors que les particules de spin demi-entier ont des fonctions d'ondes antisymétriques et obéissent au principe d'exclusion de Pauli : ce sont les fermions. Les particules de spin entier ou nul ont elles des fonctions d'ondes symétriques: ce sont les bosons.

Nous n'allons pas chercher à démontrer ce résultat fondamental mais simplement l'illustrer par une expérience fondée sur la diffusion de deux particules identiques:

Soit a et b deux particules identiques mais **discernables** (comme deux boules de billard de couleurs différentes) diffusant l'une sur l'autre. Supposons que l'on dispose à un angle prédéterminé un détecteur capable de signaler le passage de la particule a ou b et de les identifier (elles sont donc en ce sens discernables). Le déclenchement du détecteur correspond donc à deux scénarios possibles et discernables:



Soit  $|\psi(\theta)\rangle$  l'amplitude de probabilité qu'a la particule a de diffuser à l'angle  $\theta$ . Dans la mesure où les deux cas sont discernables, la probabilité  $P$  de déclencher le détecteur est, de façon classique, la somme des probabilités de chacun des cas :  $P = \langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle + \langle \psi(\pi - \theta) | \psi(\pi - \theta) \rangle$ .

Considérons le cas particulier où  $\theta = 90^\circ \Rightarrow P_{\text{discer.}} = 2 \left\langle \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \middle| \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\rangle$ .

Plaçons nous maintenant dans le cas de deux particules identiques et indiscernables, ce qui correspond à la réalité du monde des particules. Alors le cas 2 correspond à l'opération de permutation des particules a et b du cas 1 :  $|\psi_2\rangle = \hat{P}_{ab} |\psi_1\rangle$

Si les particules sont des bosons alors  $|\psi(\pi - \theta)\rangle = |\psi(\theta)\rangle$

Si les particules sont des fermions alors  $|\psi(\pi - \theta)\rangle = -|\psi(\theta)\rangle$

De plus les deux cas étant indiscernables, nous retombons ici dans le cas où ce sont les amplitudes de probabilité qui se superposent.

Pour des bosons (à  $\theta = 90^\circ$ ) les amplitudes sont constructives:

$$P_{\text{bosons}} = \langle \psi(\theta) + \psi(\pi - \theta) | \psi(\theta) + \psi(\pi - \theta) \rangle = \left\langle \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) + \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \middle| \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) + \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\rangle$$

$$= \left\langle 2\psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \middle| 2\psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\rangle = 4 \left\langle \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \middle| \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\rangle = 2P_{\text{discer.}}$$

On obtient une probabilité double que pour des particules discernables.

Pour des fermions (à  $\theta = 90^\circ$ ) les amplitudes sont destructives:

$$P_{\text{fermion}} = \langle \psi(\theta) + \psi(\pi - \theta) | \psi(\theta) + \psi(\pi - \theta) \rangle = \left\langle \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) - \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \middle| \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) - \psi\left(\frac{\pi}{2}\right) \right\rangle = 0$$

La probabilité que des fermions identiques et indiscernables aient le même angle de diffusion ( $\cong$  même état) est nul. On retrouve ici le concept du principe d'exclusion de Pauli

On montre en fait que les fermions de spin  $\frac{1}{2}$  pouvant être distingués par un spin haut ou un spin bas dans la moitié des cas (spin antiparallèle), la probabilité ne s'annule pas totalement et l'on obtient:

$$P_{\text{fermions}} = \frac{1}{2} (\langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle + \langle \psi(\pi - \theta) | \psi(\pi - \theta) \rangle) = \langle \psi(\theta) | \psi(\theta) \rangle = \frac{1}{2} P_{\text{discer.}}$$

La probabilité est ici divisée par 2.

Revenons un instant sur le comportement des bosons: nous avons vu, à l'inverse des fermions, que la probabilité pour que les bosons se trouvent dans le même état est doublé par rapport au cas classique. On montre avec un raisonnement similaire que de façon générale par interférence constructive si  $P(n)$  est la probabilité d'avoir  $n$  bosons identiques dans le même état et  $P(1)$  la probabilité d'avoir 1 particule dans cet état, alors  $P(n+1) = (n+1) \cdot P(1) \cdot P(n)$  et non simplement  $P(1) \cdot P(n)$  comme un raisonnement classique l'aurait montré. On peut traduire ceci en disant que si l'on a  $n$  bosons dans un état identique, alors la probabilité pour qu'un  $(n+1)$ ème boson les rejoignant se mette dans un état identique est multiplié par  $n+1$ , et ainsi de suite. On comprend que ce comportement quantique particulier puisse alors devenir observable à un niveau macroscopique, à l'exemple des photons dans un laser.



## 7 NOTION DE PARITÉ

Nous ne ferons qu'évoquer ici cet observable spécifiquement quantique que nous reverrons très souvent sur les schémas de désintégrations nucléaires. Dans ce domaine nous avons souvent affaire à des systèmes pour lesquels le potentiel est symétrique par rapport à l'origine  $\Leftrightarrow V(x) = V(-x)$ . Il est alors intéressant d'introduire l'opérateur parité  $\hat{P}$  (à ne pas confondre avec l'opérateur transmutation) défini par :  $\hat{P}|\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle$ . On démontre aisément que cet opérateur est un opérateur hermitique et donc correspond à une grandeur observable. On remarque à nouveau que  $\hat{P}^2$  est égal à l'opérateur identité.

Considérons maintenant l'opérateur hamiltonien  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ . On constate alors que  $\hat{P}\hat{H} = \hat{H}\hat{P} \Leftrightarrow \hat{H}$  commute avec  $\hat{P}$

$$\Rightarrow \exists |\psi\rangle \text{ vecteur propre commun à } \hat{H} \text{ et } \hat{P} / \hat{P}^2|\psi\rangle = \varepsilon^2|\psi\rangle = |\psi\rangle \Rightarrow \varepsilon = \pm 1$$

$$\varepsilon = +1 \Rightarrow \hat{P}|\psi(x)\rangle = |\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle \quad |\psi(x)\rangle \text{ est donc une fonction paire en } x$$

$$\varepsilon = -1 \Rightarrow \hat{P}|\psi(x)\rangle = -|\psi(x)\rangle = |\psi(-x)\rangle \quad |\psi(x)\rangle \text{ est donc une fonction impaire en } x$$

Pour de tels systèmes toutes les solutions sont soit des fonctions paires soit impaires.

**De plus pour les systèmes isolés la parité ( $\pm 1$ ) est une constante.**

A titre d'exemple nous utiliserons dans l'étude des réactions nucléaires la conservation de la parité d'un système qui s'écrit  $\pi = (-1)^{\sum l_i}$  où  $l_i$  est le moment cinétique orbital de la particule  $i$ .

Rappelons toutefois que l'interaction faible viole cette loi de conservation.

## .CHAP. 6 PHÉNOMÈNES TRANSITOIRES

### 1 PROBLÉMATIQUE

Ce chapitre est une approche des méthodes utilisées pour déterminer théoriquement la probabilité qu'un système effectue une transition d'un état initial vers un état final. Ce sera essentiellement pour nous les phénomènes de désintégration  $\beta$  et d'émission  $\gamma$ . Ce type de problèmes reste assez difficile car ici les paramètres, et notamment le hamiltonien du système, sont dépendants du temps. La plupart des méthodes utilisées, outre la simulation numérique, utilisent des approximations pour résoudre ces problèmes. Nous allons décrire ici la méthode dite des perturbations dépendant du temps.

### 2 THÉORIE DES PERTURBATIONS DÉPENDANT DU TEMPS.

Nous allons tout d'abord considérer un système stationnaire dont le hamiltonien  $\hat{H}_0$  ne dépend pas du temps. Nous écrirons  $\left\{ |\psi_i(t)\rangle = |\psi_i(0)\rangle e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} \right\}$  la base des vecteurs propres

de ce système. Nous considérons tout d'abord un système dans l'état propre  $|\psi_m(t)\rangle$ . Notons que dans l'état ce système est stationnaire, c'est à dire qu'il est "bloqué" dans cet état et ne peut évoluer vers un état différent. Nous allons alors supposer qu'à un instant  $t$  particulier intervient une interaction interne qui introduit un potentiel perturbateur  $\hat{V}$  dont la valeur est très petite devant le hamiltonien principal du système. Nous supposons que cette perturbation fait évoluer le système vers un état  $|\psi(t)\rangle$ . Le potentiel perturbateur étant petit, nous écrirons encore les fonctions d'ondes du système dans la base définie par  $\hat{H}_0$  :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle \quad (1)$$

Cette fonction d'onde doit satisfaire l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

Dérivons l'équation (1) par rapport au temps:

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \sum_n \frac{da_n(t)}{dt} |\psi_n(t)\rangle + \sum_n a_n(t) \frac{\partial |\psi_n(t)\rangle}{\partial t} \quad \text{or nous savons que :}$$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_n(t)\rangle}{\partial t} = E_n |\psi_n(t)\rangle = \hat{H}_0 |\psi_n(t)\rangle \quad (3) \Rightarrow$$

$$\frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \sum_n \dot{a}_n(t) |\psi_n(t)\rangle + \sum_n a_n(t) \frac{E_n}{i\hbar} |\psi_n(t)\rangle = \left( \sum_n \dot{a}_n(t) + \sum_n a_n(t) \frac{E_n}{i\hbar} \right) |\psi_n(t)\rangle$$

avec la notation  $\dot{a}_n(t) = \frac{da_n(t)}{dt}$ .

En injectant cette équation dans l'équation (2) on obtient:

$$i\hbar \left( \sum_n \dot{a}_n(t) + \sum_n a_n(t) \frac{E_n}{i\hbar} \right) |\psi_n(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \sum_n a_n(t) |\psi_n(t)\rangle \Rightarrow$$

en utilisant le membre de droite de (3) il vient :

$$i\hbar \sum_n \dot{a}_n(t) |\psi_n(t)\rangle = \sum_n a_n(t) \hat{V} |\psi_n(t)\rangle$$

Multiplions maintenant cette équation à gauche par  $\langle \psi_k(t) |$  en se rappelant que la base des vecteurs propres est orthonormée.  $\Rightarrow$

$$\dot{a}_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n(t) \langle \psi_k(t) | \hat{V} | \psi_n(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \sum_n a_n(t) \langle \psi_k(0) | \hat{V} | \psi_n(0) \rangle e^{i\omega_{kn}t} \text{ avec}$$

$$\omega_{kn} = \frac{E_k - E_n}{\hbar}$$

$\langle \psi_k | \hat{V} | \psi_n \rangle$  représente l'élément  $(kn)$  de la matrice  $\hat{V}$ , élément que nous noterons  $V_{kn}$ .  
Ayant supposé que la perturbation est très faible, de sorte que l'augmentation de probabilité pour un autre état que l'état initial  $|\psi_m(t)\rangle$  est très petite ( $a_{n \neq m}(0) = 0$  et  $\dot{a}_n(t)$  négligeable) nous pouvons dans la théorie des perturbations au premier ordre écrire  $a_m = 1$  et  $a_{n \neq m} = 0$

dans le membre de droite  $\Rightarrow \dot{a}_k(t) = \frac{1}{i\hbar} V_{km} e^{i\omega_{km}t} \Rightarrow \boxed{a_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \int V_{km} e^{i\omega_{km}t} dt}$ .

La probabilité de trouver le système dans l'état  $|\psi_k\rangle$  est alors donnée à chaque instant par  $|a_k(t)|^2$ . La valeur de  $V_{km}$  peut être approché par la connaissance de l'interaction responsable de la transition ou à l'inverse déduite par la mesure directe de la probabilité de transition ( $\Leftrightarrow$  "période" d'un radioélément).

Remarque : Si l'on suppose que dans le voisinage de  $E_m$  la valeur de  $V_{km}$  est constante et que l'essentiel de la perturbation produit ces effets dans un intervalle de temps  $t_1$  alors

$$a_k = \frac{V_{km}}{\hbar} e^{i\omega_{km}t} \frac{2i \sin(\omega_{km}t_1)}{\omega_{km}}.$$

On montre alors que la probabilité par unité de temps de transition de l'état initial vers tous

les états finaux possibles s'écrit  $\lambda \approx \frac{1}{t_1} \sum_k |a_k|^2 = \frac{1}{t_1} \int_{-\infty}^{+\infty} |a_k|^2 d\hbar\omega$ . L'allure de la fonction

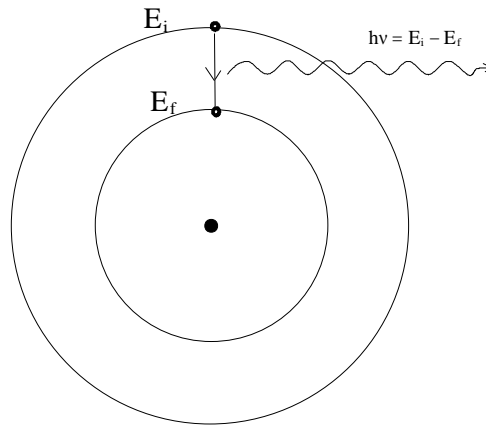
$\frac{\sin^2(\omega_{km}t_1)}{\omega_{km}^2}$  montre que l'essentiel de la contribution de l'intégrale s'obtient dans l'intervalle

$$-2\pi \leq \omega_{km}t_1 \leq 2\pi \Leftrightarrow \Delta\omega_{km} \cdot t_1 \leq 2\pi \Leftrightarrow \Delta E \cdot t_1 \leq h$$

On retrouve ici, au même ordre de grandeur, l'inégalité d'Heisenberg sur le couple temps-énergie.

### 3 APPROCHE EXPÉRIMENTALE. LARGEUR NATURELLE.

Nous allons considérer ici une population de  $N_0$  atomes tous dans un état initial identique à l'instant  $t = 0$ , qui vont effectuer une transition vers un état final différent. Ce pourra être par exemple la transition d'un électron d'une couche d'énergie  $E_i$  vers une couche de plus basse énergie  $E_f$ . Cette transition s'accompagne en général de l'émission d'un photon d'énergie  $h\nu = E_i - E_f$ .



La mesure expérimentale de l'évolution statistique de la population initiale d'atomes montre qu'à l'instant  $t$  le nombre  $N(t)$  d'atomes n'ayant pas encore effectué la transition est égal à :

$$N(t) = N_0 e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (1)$$

On peut facilement montrer que le facteur  $\tau$ , homogène à un temps, représente la durée de vie moyenne des atomes dans l'état initial. Ainsi que nous l'avons déjà vu dans le chapitre sur les inégalités d'Heisenberg, nous pouvons associer à cette durée de vie  $\tau$  une indétermination sur la mesure en énergie de  $E_i$  :  $\Delta E_i = \frac{\hbar}{\tau}$ . Cette indétermination, souvent

notée  $\Gamma$ , est appelée largeur naturelle du niveau  $E_i$ . (à ne pas la confondre avec la différence de niveau  $\Delta E = E_i - E_f$ ). Nous allons voir que cette indétermination est absolument fondamentale et nécessaire pour que la transition puisse s'effectuer. Il n'est pas inutile d'insister encore ici sur l'origine du comportement probabiliste ondulatoire des particules permettant une approche théorique de ce phénomène.

La transcription de la loi statistique (1) à un atome nous donne alors une loi probabiliste qui s'énonce ainsi : la probabilité pour qu'un atome soit toujours dans l'état initial ( $E_i$ ) à l'instant  $t$

est :  $P(t) = e^{-\frac{t}{\tau}} = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t} \quad (2).$

Nous allons revenir maintenant à une description quantique du problème. On peut, en première approximation, déterminer les niveaux d'énergie de l'atome en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps :  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ .

$E_i$  et  $E_f$  sont alors des valeurs propres de cette équation correspondant aux états propres  $|\psi_i\rangle$  et  $|\psi_f\rangle$ . L'état de l'atome à l'instant  $t$  peut s'écrire comme combinaison linéaire de ces deux états :  $|\psi(t)\rangle = a_i(t)|\psi_i\rangle + a_f(t)|\psi_f\rangle$ . Dans cette expression  $|a_i(t)|^2$  représente la probabilité que l'atome soit toujours dans l'état initial à l'instant  $t$ . Or nous avons vu que si l'on reste dans une formulation stationnaire du problème, l'expression dépendante du temps de la fonction d'onde de l'état initial s'écrit :

$$|\psi_i(t)\rangle = e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} |\psi_i\rangle$$



On aura de même:

$$|\psi_f(t)\rangle = e^{-i\frac{E_f}{\hbar}t} |\psi_f\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_i}{\hbar}t} |\psi_i\rangle + e^{-i\frac{E_f}{\hbar}t} |\psi_f\rangle \Rightarrow |a_i(t)|^2 = 1 \text{ et } |a_f(t)|^2 = 1$$

Or par hypothèse les conditions initiales du système sont:

$$|a_i(0)|^2 = 1 \text{ et } |a_f(0)|^2 = 0 \text{ et l'expérience montre que } |a_i(t)|^2 = P(t) = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t}.$$

On voit donc que cette description n'autorise pas de transition entre les deux états: le niveau initial reste bloqué. On ne pouvait s'attendre à moins avec une formulation stationnaire! La réalité montre que les deux états propres ne sont pas strictement indépendants mais bel et bien couplés par l'interaction électromagnétique qui est à l'origine de la perturbation qui va permettre la transition entre les deux états. Ce couplage électromagnétique se traduit de fait par l'émission du photon d'énergie

$h\nu = E_i - E_f$ . La probabilité  $|a_i(t)|^2 = P(t) = e^{-\frac{\Gamma}{\hbar}t}$  s'obtient aisément si l'on introduit dans la

solution stationnaire  $|\psi_i(t)\rangle$  un terme supplémentaire:  $|\psi_i(t)\rangle = e^{-i(\frac{E_i - \frac{\Gamma}{2}}{\hbar})t} |\psi_i(0)\rangle$ . **Ce terme supplémentaire correspond, on le voit, à un terme d'énergie complexe ! Ceci correspond donc à une quantité inobservable, ce qui est le propre d'une indétermination.** On rejoint de plus ici la notion de virtualité. En effet ce terme d'énergie complexe introduit dans la probabilité de l'état une exponentielle réelle décroissante qui signifie que la probabilité d'existence de l'état diminue en fonction du temps. Dans le phénomène particulier que nous venons d'étudier la valeur de  $\Gamma$  est très petite devant les énergies de transition ( $\Gamma \cong 10^{-3}$  eV pour des transitions pouvant atteindre quelques  $10^4$  eV). Ceci n'est plus le cas lorsque l'on considère l'échange d'une particule virtuelle d'interaction où l'indétermination sur l'énergie est du même ordre que la masse au repos de la particule. Le temps de vie de la particule est si bref (on trouve souvent des temps d'interaction de l'ordre de  $10^{-24}$  secondes) qu'il est difficile de dire que la particule a eu une existence réelle.

