

Cours de la Mécanique Quantique - SMP4

Pr. Mohammed El Falaki

Département de Physique
Faculté des Sciences
Université Chouaïb Doukkali, El Jadida

Année Universitaire 2020-2021

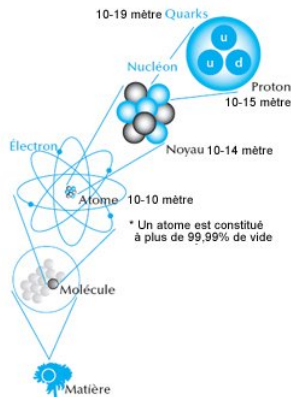


Chapitre 1 : Début de la Mécanique de la Mécanique Quantique

1. Chapitre 1 : Début de la Mécanique Quantique
2. Chapitre 2 : Mécanique Ondulatoire
3. Chapitre 3 : Formalisme mathématique de la Mécanique Quantique
4. Énoncé des postulats
- 4.1 Postulat 1 : Description de l'état d'un système
5. Postulat 4 : Décomposition spectrale
6. Conservation de la norme
7. Définition et propriétés
8. Représentation de Schrödinger
9. Représentation de Heisenberg
10. Équation de mouvement de Heisenberg

Qu'est ce que c'est que la mécanique quantique ?

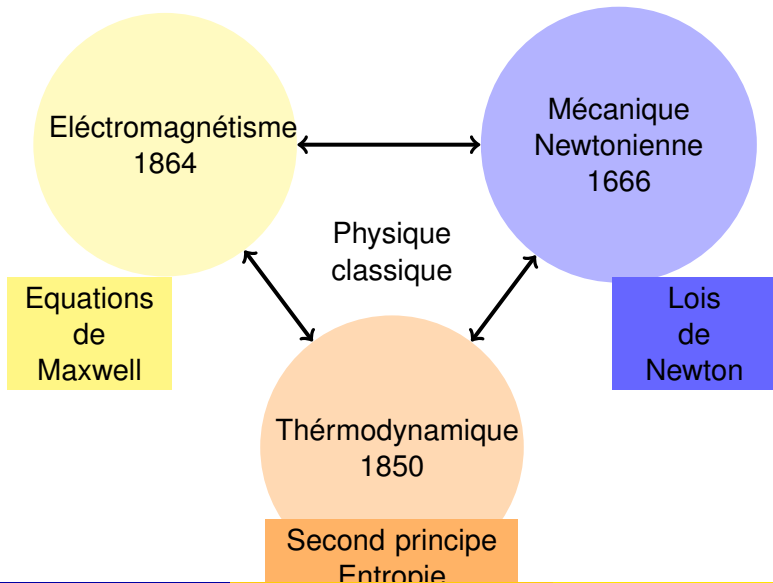
La mécanique quantique est une branche de la physique qui décrit le comportement des objets microscopiques : les molécules, les atomes ou les particules (électrons, protons, gluons...).



Succès et échecs de la physique classique

- ① **Aperçu sur la physique classique**
- ② Succès de la physique classique
- ③ Crise de la physique classique

Aperçu sur la physique classique



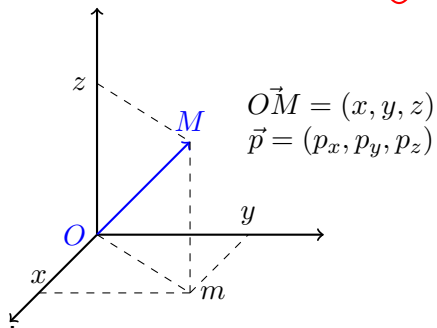
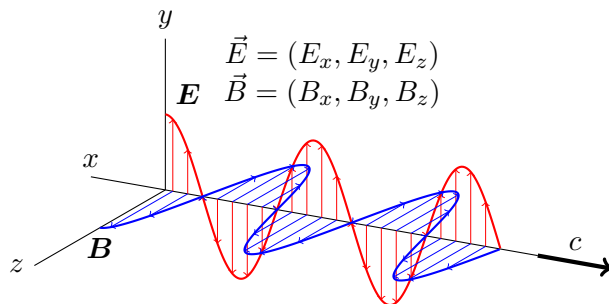
Aperçu sur la physique classique

- la **continuité** (passage d'un point à un autre par les points intermédiaires)
- la **causalité** locale (enchaînement de cause et d'effet) et de séparabilité (plus on éloigne deux objets, moins ils ont d'interaction)
- le **déterminisme** et prévisibilité (prédiction de l'évolution d'un système à n'importe quel moment du temps)
- l'**objectivité** (séparation totale entre l'observateur et l'objet).
la physique classique est un miroir de la réalité, elle est suffisante pour expliquer les phénomènes de la vie quotidienne.

Succès de la physique classique

A la fin du 19^{ème} siècle, les lois de la physique classique permettent d'étudier les deux entités qui constituent l'univers :

- **Matière** : ensemble de particules qui possèdent une masse et occupent une position dans l'espace qui sont décrits par la la mécanique classique. les grandeurs physiques sont exprimées en terme des variables dynamiques $\vec{r} = (x, y, z)$ et $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$.
- **Rayonnement** : rayonnement engendré par le mouvement accéléré d'une charge électrique. c'est une onde électromagnétique dont l'évolution est décrite par les équations du Maxwell. les variables dynamiques utilisées sont les composantes du champ électrique $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$ et le champ magnétique $\vec{B} = (B_x, B_y, B_z)$



Crise de la physique classique

Au début du 20^{ème} siècle, la physique classique devient incapable d'expliquer les résultats de certaines observations expérimentales..

la physique classique se trouve en conflit violent avec l'observation.

quelles sont les expériences qui ont noirci le ciel de la physique classique ?

Crise de la physique classique

Expériences en question

Les expériences qui furent sans doute historiquement à l'origine de la naissance de la mécanique quantique sont

- 1 Le rayonnement du corps noir
- 2 L'effet photoélectrique
- 3 l'effet Compton

Naissance de la mécanique quantique

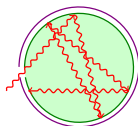
Rayonnement du corps noir

Définition

un corps noir (Gustav Kirchhoff en 1862) est un corps qui **absorbe tous les rayonnements électromagnétiques**, il absorbe toute forme de radiation dirigée vers lui en **augmentant sa température** (100% absorbeur et 0% réflecteur).

physiquement on modélise un corps noir par une cavité percée d'un petit trou, réalisée de telle façon :

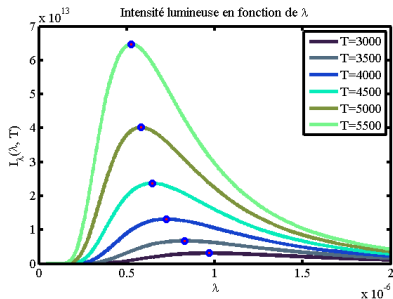
- *Tout le rayonnement pénétrant par le trou est piégé à l'intérieur de la cavité et qui subira une série de réflexions de sorte qu'il a très peu de chance d'en ressortir.*
- *une partie très faible du rayonnement émis par la face interne de la paroi*



Rayonnement du corps noir

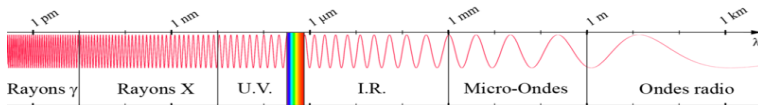
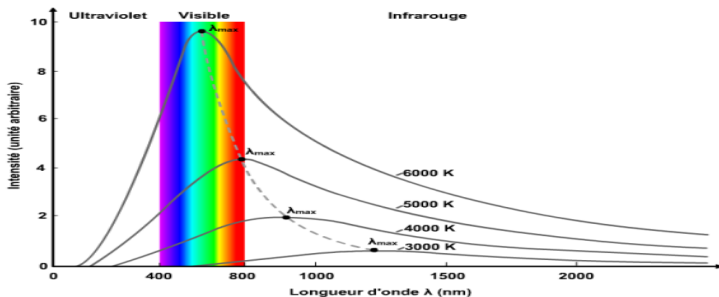
Résultat expérimentaux

- l'absorption et l'émission du rayonnement à l'intérieur de la cavité permet de mesurer l'intensité lumineuse volumique (émittance ou radiation spectrale) issue du trou $I_\lambda(\lambda, T)$, ($W m^{-3}$) provenant suivant toutes les longueurs d'onde λ .
- le spectre présente, à chaque température, un pic (maximum) d'intensité.
- Plus le corps noir est chaud, plus il émet de lumière dans le visible.



Rayonnement du corps noir

Résultat expérimentale



Rayonnement du corps noir

Résultat expérimentale

- Loi de Stefan (1879) :**

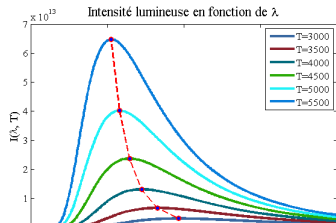
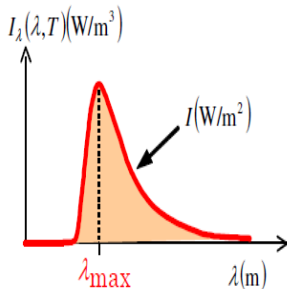
l'intensité totale du rayonnement issu de la cavité est proportionnelle à la puissance quatrièmement de la température

$$I(T) = \int_0^{\infty} I_{\lambda}(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4$$

avec $\sigma = 5,670.10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$

- Loi du déplacement de Wien :**

La longueur d'onde maximale λ_M d'émission d'un corps noir est inversement proportionnelle à sa température.



Rayonnement du corps noir : Interprétation théorique

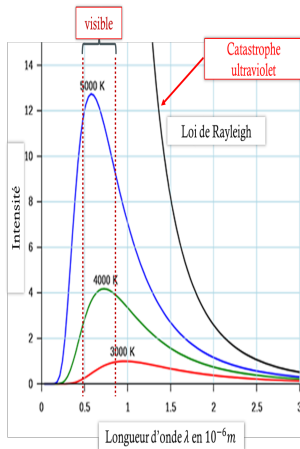
Loi de Raleigh-Jeans

Rayleigh et Jeans 1900, utilisent la théorie électromagnétique et la mécanique statistique pour déterminer le spectre des corps noir. Ils ont montré que la densité d'énergie électromagnétique à l'intérieur de la cavité est donnée par :

$$u_\nu(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2 d\nu \quad (1)$$

$$u_\lambda(\lambda, T)d\lambda = 8\pi kT \frac{d\lambda}{\lambda^4} \quad (2)$$

où k est la constante de Boltzmann et $\nu = c/\lambda$ est la fréquence et c est la vitesse de la lumière dans le vide.



Rayonnement du corps noir

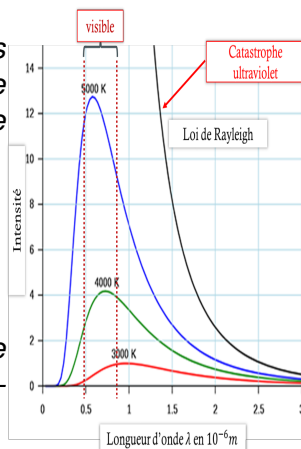
interprétation de Rayleigh-Jeans

- la loi de Rayleigh et Jeans ne prédit pas l'existence d'un maximum d'intensité à une fréquence donnée mais elle conduit à une énergie totale infinie.

$$\int_0^{\infty} u_{\nu}(\nu, T) d\nu \rightarrow \infty$$

C'est **“la catastrophe de l’ultraviolet”**.

- la loi de Rayleigh-Jeans est incapable de donner une interprétation physique (classique) du rayonnement du corps noir.



Rayonnement du corps noir

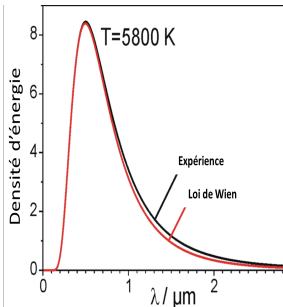
interprétation de Wien

Wien suggéra en 1896 une densité d'énergie de la forme

$$u_\nu(\nu, T) = a\nu^3 e^{-\frac{b\nu}{T}} \quad \text{formule de Wien} \quad (3)$$

a et b sont deux constantes.

- Cette formule décrit une loi de puissance dans le domaine des faibles fréquences, et une atténuation exponentielle à haute fréquence.
- la formule n'est pas en accord avec l'expérience dans les domaines des hautes températures ($\frac{b\nu}{T} \ll 1$). La densité d'énergie devient indépendante de T !



Rayonnement du corps noir

interprétation de Plank

- Le 19 octobre 1900, Max Planck a publié l'expression de la formule universelle du rayonnement thermique qui n'était qu'une interpolation des formules de Rayleigh-Jeans et de Wien. (en ne se basant sur aucune interprétation physique)

$$u(\nu, T) = \frac{A(\nu/c)^3}{e^{\frac{B\nu}{T}} - 1}; A \text{ et } B \text{ sont des constantes} \quad (4)$$

- le 14 décembre 1900, Max Planck a réagi par un nouvel article qui a basculé la physique classique. Il a énoncé que
 “Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement ne se font pas de façon continue mais par quantités **discrètes et indivisibles d'énergie $h\nu$ appelées quanta.**”

Rayonnement du corps noir

interprétation de Plank

- la fameuse formule de Planck (4) s'écrit donc :

$$u_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi h(\nu/c)^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (5)$$

où h est la constante de Planck (c'est une abréviation du mot Allemand "Hilfe", au secours!).

- h est une constante de la mécanique quantique qui caractérise le monde à l'échelle microscopique sa valeur est $h = 6.62608 \times 10^{-34} \text{ J.s}$.
 - pour les faibles fréquences $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$, on retrouve la formule de Rayleigh et Jeans (1).
 - pour les hautes fréquences $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$, on retrouve la formule de Wein (3).

Cette fameuse découverte de Plank a donné naissance à une nouvelle théorie physique : **PHYSIQUE QUANTIQUE**

Aspect Corpusculaire de la lumière

Effet photoélectrique

Effet Compton

Effets photoélectrique : 1887

Définition

Quand un métal est exposé à la lumière, des électrons peuvent être éjectés de la surface du métal ; Le préfixe "photo"- indique simplement que les électrons ont arrachés de la surface du métal par une lumière incidente.

le phénomène a été découverte pour la première fois par le physicien Allemand Heinrich Hertz en 1887.

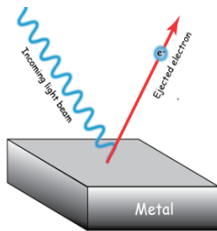
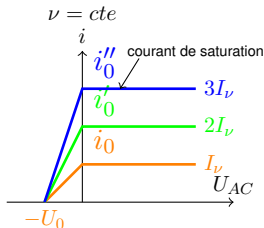
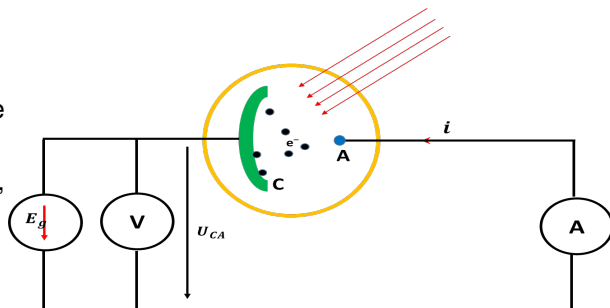


Figure – plaque éclairée par la lumière

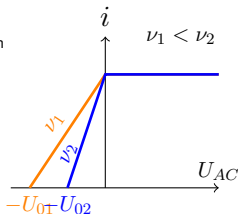
Effets photoélectrique

Expérience de Lennard : 1902

Lorsqu'on éclaire la cathode par une radiation monochromatique, un courant d'intensité i peut traverser le circuit



Effet de l'intensité de la lumière

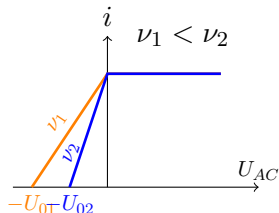


Effet de la fréquence

Effet Photoélectrique

Résultats expérimentales

Effet de l'intensité lumineuse sur le courant de saturation et la tension d'arrêt

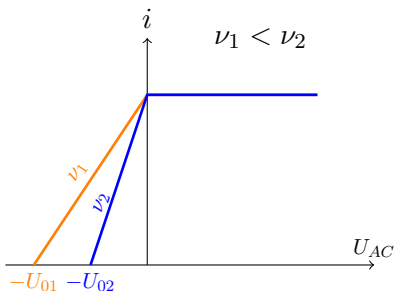


- On constate que le courant de saturation croît avec l'intensité lumineuse dans la région $U_{AC} > 0$.
- Lorsque la tension U_{AC} est nulle, un courant i_0 traverse encore le circuit.
- Le courant s'annule à une tension U_0 , appelée **tension d'arrêt**. Cet effet de seuil de l'intensité lumineuse I_ν .

Effet Photoélectrique

Résultats expérimentaux

Effet de la fréquence sur le courant de saturation

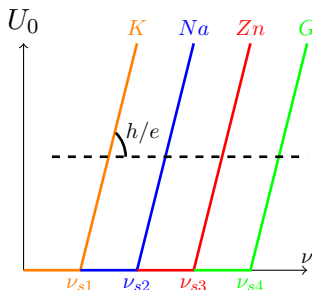


- le potentiel d'arrêt dépend de la fréquence, il est nul pour $\nu < \nu_0$
- le courant de saturation n'est pas affecté directement par la variation des fréquences

Effet Photoélectrique

Résultats expérimentaux

effet de la fréquence sur le potentiel d'arrêt.



- Le potentiel d'arrêt U_0 dépend de la fréquence : il est nul pour $\nu < \nu_s$
- Le potentiel d'arrêt U_0 croît linéairement avec ν pour $\nu > \nu_s$ avec la même pente h/ν .
- la fréquence de seuil ν_s dépend du matériau irradié et ne dépend pas de l'intensité de la lumière.

Effets photoélectrique

constations expérimentales

En résumé, les expériences réalisées sur l'effet photoélectrique montrent que :

- 1 *l'effet photoélectrique apparait à une fréquence $\nu > \nu_s$ et il est instantané.*
- 2 *la tension d'arrêt U_0 est indépendante de l'intensité de la lumière.*
- 3 *la tension d'arrêt est proportionnelle à fréquence de la lumière.*
- 4 *le courant de saturation i circulant dans le circuit ne dépend pas de la fréquence d'irradiation.*

Effets photoélectrique

Interprétation classique

La physique classique n'est pas capable de donner une explication physique à ces observations expérimentales. la densité d'énergie électromagnétique rayonnée est donnée par :

$$\mathcal{E}_r = \frac{1}{2\mu_0} B^2 + \frac{\epsilon_0}{2} E^2$$

le bilan des énergies permet d'écrire :

$$\mathcal{E}_r = W_e + eU_0, \quad \text{avec } U_0 = \frac{mV^2}{2e}$$

- \mathcal{E}_r est l'énergie électromagnétique du rayonnement
- W_e est le travail nécessaire pour extraire les électrons du métal
- E_c est l'énergie cinétique des électrons qui quittent le métal vers l'anode

On constate que la tension d'arrêt **dépend de l'intensité** de rayonnement et **ne dépend pas fréquence**. Ce qui n'est pas en accord avec l'expérience. !!!

Effets photoélectrique

Interprétation classique

- Incapable d'expliquer la fréquence seuil : *Avec le temps, l'électron pourrait toujours acquérir suffisamment d'énergie pour s'échapper.*
- Incapable d'expliquer pourquoi le potentiel d'arrêt U_0 est indépendant de l'intensité lumineuse : *si le courant i augmente alors l'énergie devrait augmenter.*
- Incapable d'expliquer l'émission instantanée : *Le retard d'émission calculé est beaucoup plus grand que celui mesuré expérimentalement.*

Effets photoélectrique

Interprétation d'Einstein

- *Einstein a postulé que la lumière se décompose en grains d'énergie appelés photons.*
- *les photons sont des corpuscules de masse $m = 0$ qui se déplacent à la vitesse de la lumière c , d'énergie $h\nu$ et d'impulsion :*

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

avec λ est la longueur d'onde du rayonnement

- *Le champ électromagnétique est un ensemble de photons, son énergie dépend de la fréquence des photons et de leurs nombre.*
- *L'effet photo-électrique résulte de l'interaction d'un seul photon avec un seul électron en lui cédant toute son énergie avant qu'il disparait.*

Effets photoélectrique

Interprétation d'Einstein

La collision photon-électron est supposée élastique :

$$\mathcal{E}_\nu = W_s + E_c$$

En supposant que les échanges d'énergie entre le rayonnement et la matière s'effectuent uniquement par paquets d'énergie.

$$\mathcal{E}_\nu = h\nu, \quad \text{où } \nu \text{ est la fréquence du rayonnement}$$

Pour qu'un photon puisse arracher un électron du métal, il faut que son énergie soit supérieure au travail d'extraction W_s .

$$h\nu \geq W_s \Rightarrow \nu \geq \frac{W_s}{h} = \nu_s$$

avec ν_s est la fréquence minimale pour laquelle l'effet photoélectrique est observé.

on en déduit que le potentiel d'arrêt est donné par

$$U_0 = \frac{h}{e}(\nu - \nu_s)$$

Exercices

Exercice (3)

- ① Calculer l'énergie des photons de la lumière visible
 $\lambda \in [400nm, 700nm]$.
 - $E = h\nu = hc/\lambda$, donc $E \in [1,77ev, 3,1ev]$,
 $(1ev = 1.6.10^{-19}j)$
- ② L'intensité de la lumière solaire à la surface terrestre est environ $1400Wm^{-2}$. Si l'énergie moyenne d'un photon est de $2eV$, calculez le nombre de photons frappant une surface de $1cm^2$ à chaque seconde
 - A chaque seconde, l'intensité de l'énergie solaire est de $0.14J/cm^2 = 8,75.10^{-7}ev$. Le nombre de photons, N , frappant une surface $1cm^2$ est : $N = 4,38.10^{17}$ photons.

Exercices

Exercice (4)

Le travail d'extraction d'un électron du zinc est $W_s = 3,3eV$.

- 1 Calculer la fréquence seuil et la longueur d'onde seuil du zinc.

$$\nu_s = \frac{W_s}{h} = \frac{3,3 \times 1,6 \cdot 10^{-19}}{6,62 \cdot 10^{-34}} = 8 \cdot 10^{14} Hz$$

la longueur d'onde $\lambda_s = \frac{c}{\nu_s} = 375nm$

- 2 On éclaire le zinc par une radiation UV de longueur d'onde $\lambda = 250nm$. Calculer l'énergie cinétique maximale de sortie des électrons et leur vitesse.

- L'énergie cinétique maximale des électrons éjectés est

$$E_{c,max} = h\nu - W_s = h(\nu - \nu_s) = hc\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_s}\right) = 1,65eV$$

$$\sqrt{2E_c}$$

Exercices(suite)

Exercice (4)

Le travail d'extraction d'un électron du zinc est $W_s = 3,3eV$.

3. On éclaire le zinc par la lumière d'un arc électrique en interposant une plaque de verre qui absorbe les ondes de longueur d'onde inférieure à $420nm$. Un effet photoélectrique est-il observé ?
 - la longueur d'onde seuil est la longueur d'onde maximale pour observer l'effet photoélectrique.
Dans le cas d'exercice, l'effet photoélectrique est observé pour $\lambda \leq \lambda_s = 375nm$. la plaque de verre absorbe les ondes de longueur d'onde inférieure à $420nm$, donc on ne peut pas observer l'effet photoélectrique

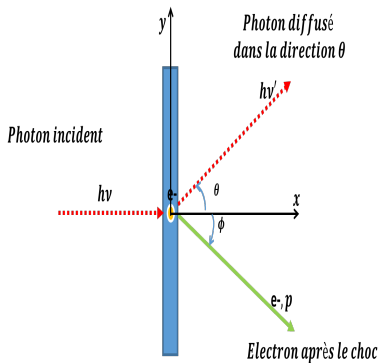
Aspect Corpusculaire de la lumière

Effet photoélectrique
Effet Compton

Effets Compton(1923)

Définition

L'effet Compton est une collision élastique entre un photon de grande énergie et un électron de la couche de externe d'un noyau d'atome. l'expérience réalisée par Arthur Compton consiste à bombarder une couche mince de graphite par des rayons X.

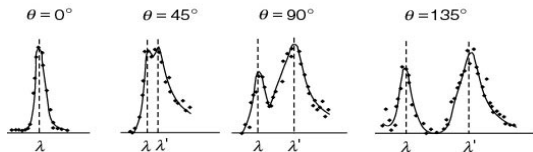


Figure

Effets Compton(1923)

résultats expérimentaux

En mesurant la longueur d'onde des photons diffusés en fonction de l'angle de diffusion θ , on constate que le spectre contient deux pics principaux de longueur d'onde respectives λ et λ' dont l'écart $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$



la figure montre que $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ varie fortement avec l'angle de diffusion θ (la direction d'observation) . λ est la longueur d'onde du rayonnement incident.

la physique classique est incapable d'expliquer le dédoublement de la longueur d'onde !

Effets Compton(1923)

Interprétation théorique

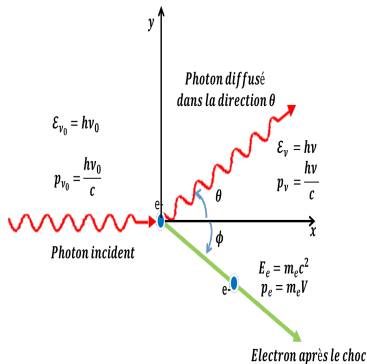
on suppose que la collision photon-électron est élastique.

Les lois de conservation de la quantité du mouvement et de l'énergie relativiste nous permettent d'écrire :

$$\mathcal{E}_{\nu_0} + E_0 = \mathcal{E}_{\nu} + E_e \quad (6)$$

$$\vec{P}_{\nu_0} = \vec{P}_{\nu} + \vec{P}_e \quad (7)$$

où \mathcal{E}_{ν_0} , \vec{P}_{ν_0} et \mathcal{E}_{ν} , \vec{P}_{ν} sont respectivement les énergies et quantité de mouvement des photons incident et diffusé et E_0 l'énergie de l'électron au repos et E_e son énergie et sa quantité de mouvement après le choc avec le photon. l'électron étant au repos avant le choc.



Effets Compton

Interprétation théorique

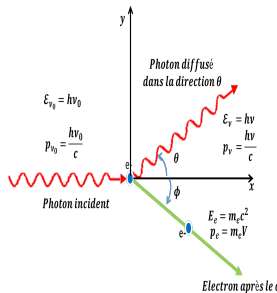
l'équation de la conservation de l'énergie (6) peut s'écrire sous la forme :

$$h\nu_0 + m_e c^2 = h\nu + E_e \quad (8)$$

En projetant (6) sur les axes x et y il vient pour l'impulsion :

$$p_{\nu_0} + 0 = p_{\nu} \cos \theta + p_e \cos \phi \quad (9)$$

$$0 + 0 = p_{\nu} \sin \theta - p_e \sin \phi \quad (10)$$



Effets Compton

Interprétation théorique

Après calcul on obtient (voir démonstration polycopié) :

$$(\lambda - \lambda_0) = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad (11)$$

$$\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad (12)$$

- $\lambda_c = \frac{h}{m_e c}$ *est appelée longueur d'onde de Compton qui est en accord avec l'expérience.*
- *la formule de Compton (12) prédit l'apparition d'un deuxième pic (λ) décalé par rapport au pic principal (λ_0).*
- *le décalage dépend de θ l'angle de diffusion.*
- λ_c *n'est pas une longueur d'onde physique, mais c'est un déplacement de la longueur d'onde principale, $\lambda_c = 2,426 \text{ pm}$*

Résumé

- Le rayonnement électromagnétique est **quantifié**, les quanta d'énergie étant appelés photons. Chaque photon transporte une énergie :

$$E = h\nu$$

- Le photon étant une **particule** de masse nulle et d'impulsion :

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

- L'expérience de Compton, a permis de confirmer l'expression $h\nu$ de l'énergie et l'expression de la quantité de mouvement du photon.

Concept de la Dualité

Cas de la lumière
Cas de la matière

Concept de la Dualité

- *les expériences d'optique réalisées depuis le milieu du 19^{ème} siècle ont montré que la lumière est une onde électromagnétique régie par les équations de Maxwell.*
- *Les expériences discutées dans les sections précédentes ont mis en évidence l'aspect corpusculaire la lumière.*

la lumière possède une dualité onde-corpusculaire

Questions :

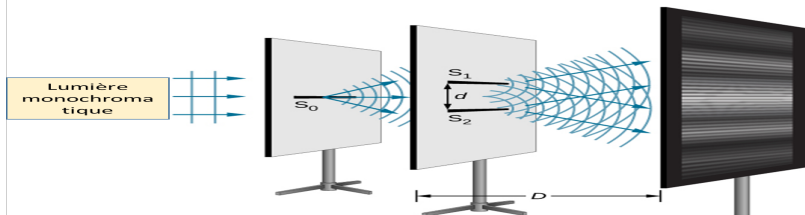
- Jusqu'à quelle limite ce comportement coexiste ?
- Peut-on séparer ces deux entités ?
- La matière possède-t-elle un aspect ondulatoire ?

Concept de la Dualité

Cas de la lumière

Expérience des fentes de young(1)

- La source lumineuse est monochromatique de longueur d'onde λ
- Les deux sources interfèrent et forment sur la plaque photographique ce que l'on appelle une figure d'interférence d'interfrange $i = \frac{\lambda D}{d}$
- La figure est caractéristique d'un **comportement ondulatoire de la lumière**



Concept de la Dualité

Cas de la lumière

Expérience des fentes d'Young(2)

On diminue l'intensité lumineuse de la source de manière à ce que la lumière soit émise photon par photon :



- Au début, chaque photon arrive individuellement en marquant une tache sur l'écran (filme photosensible). la distribution est aléatoire !.
- Au cours du temps, après accumulation de photons, on observe la construction progressive des franges d'interférences sur l'écran !
- Si on ferme l'une des deux fentes les franges d'interférences disparaissent.

● Si on place un détecteur pour savoir par quelle fente passe le photon

Concept de la Dualité

Cas de la lumière

Commentaires

- Le point d'impact d'un photon sur l'écran \Rightarrow le photon se comporte comme une particule.
- Le point d'impact d'un photon est complètement aléatoire, sa position sur l'écran n'est pas prédictible.
- La figure d'interférence observée résulte de l'effet ondulatoire du photon selon une loi de probabilité déterminée. On associe au photon une fonction d'onde $\psi(x)$
- La détection des photons met en évidence l'aspect de particule, alors que leur distribution dans l'espace a un caractère ondulatoire.

Concept de la Dualité

Cas de la lumière

Résumé

- Un photon se comporte différemment selon le nombre de chemins possibles.
- une “mesure ou observation” d’un système microscopique perturbe son état.
- Les photons sont émis sous les mêmes conditions initiales, mais on ne peut déterminer ni leurs trajectoire (par quelle fente ils se sont passés) ni leurs position (point d’impact sur l’écran). Tout ce que nous pouvons avancer que le photon a une probabilité $P(\vec{r}, t)$ d’arriver en \vec{r} à l’instant t proportionnelle à l’intensité : $I(\vec{r}, t) = |\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$.
- l’aspect corpusculaire et ondulatoire de la lumière sont complémentaires. La détection des photons sur le film met en évidence l’aspect de particule, mais leur distribution dans l’espace a un caractère d’onde. Les deux aspects ne

Concept de la Dualité

Cas de la lumière
Cas de la matière

Concept de la Dualité

Cas de la matière

Hypothèse de Broglie

En 1924, Louis de Broglie associe à toute particule matérielle de masse m et de vitesse v un comportement ondulatoire :

- un vecteur d'onde :

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$$

- une longueur d'onde de Broglie :

$$\lambda_{dB} = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

si la particule est relativiste $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$ avec $\gamma = (1 - \frac{v^2}{c^2})^{1/2}$

Exercice(5)

Si E est l'énergie de la particule et \vec{k} est le vecteur d'onde

Double Aspect Ondulatoire Et Corpusculaire

Quand doit on appliquer la mécanique quantique

Exercice(6)

déterminer la longueur d'onde de Broglie

- 1 d'un électron $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$ se déplaçant à une vitesse de $v = 1500 \text{ m/s}$

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 4,85 \cdot 10^{-7} \text{ m} = 485 \text{ nm} =$$

Elle l'ordre de grandeur de la distance à l'échelle subatomique \Rightarrow Comportement ondulatoire observable

- 2 une pierre de masse $m = 50 \text{ g}$ se se déplaçant à une vitesse de $v = 40 \text{ m/s}$

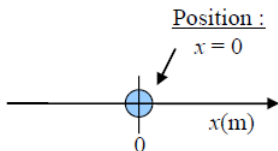
$$\lambda_{dB} = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 3,3 \cdot 10^{-34} \text{ m!!}$$

Concept de la Dualité

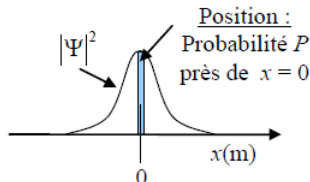
Quand doit appliquer la mécanique quantique

- la lumière et la matière possèdent un double aspect **onde-corpusculaire** \Rightarrow Particule quantique : Quanton
- Le comportement ondulatoire est seulement observable chez les objets de petites tailles : particules microscopiques : atomes, électrons, protons, neutrons,....
- A chaque particule on associe une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ qui décrit la particule quantique. La notion de la trajectoire (classique) est abandonnée.
- $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ représente la densité de probabilité de trouver la particule quantique dans une région donnée

Concept de la Dualité



❖ La **mécanique classique** permet de localiser avec certitude la **position** d'une particule à un **endroit précis**.



❖ La **mécanique quantique** permet de calculer la **probabilité** de localiser une particule dans un **intervalle de position**.

Chapitre 2 : Mécanique Ondulatoire

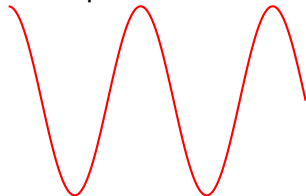
1. Chapitre 1 : Début de la Mécanique Quantique
2. Chapitre 2 : Mécanique Ondulatoire
3. Chapitre 3 : Formalisme mathématique de la Mécanique Quantique
4. Énoncé des postulats
- 4.1 Postulat 1 : Description de l'état d'un système
5. Postulat 4 : Décomposition spectrale
6. Conservation de la norme
7. Définition et propriétés
8. Représentation de Schrödinger
9. Représentation de Heisenberg
10. Équation de mouvement de Heisenberg

Fonction d'onde

La description complète de l'état d'une particule de masse m à l'instant m dans l'espace est donnée par une fonction complexe

$$\psi(\vec{r}, t), \quad \vec{r} = (x, y, z)$$

appelée : **fonction d'onde**. Elle contient toutes les informations sur la particule.



Fonction d'onde

La probabilité de trouver la particule à l'instant t dans un élément de volume $dv = d^3r = dxdydz$ est :

$$dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dv \quad (13)$$

la fonction est normée :

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t)^* \psi(\vec{r}, t)$$

Fonction d'onde

L'onde plane monochromatique progressive

$$\psi(\vec{r}, t) = C_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad \omega = 2\pi\nu \quad (14)$$

\Rightarrow

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |C_0|^2$$

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \longrightarrow \infty$$

$\psi(\vec{r}, t)$ n'est pas une fonction de carré sommable

Paquet d'onde

On peut former un état physique acceptable en superposant plusieurs fonctions d'ondes planes monochromatiques, de longueurs d'ondes assez proches. On obtient ainsi un paquet d'onde :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3 \vec{k} \quad (15)$$

$$\vec{k} \cdot \vec{r} = k_x x + k_y y + k_z z$$

,

$$d^3 k = dk_x dk_y dk_z,$$

$\phi(\vec{k})$ est une fonction complexe qui est localisée autour d'une valeur k_0 .

Paquet d'onde : Transformée de Fourier

à l'instant $t = 0$ l'équation (15) devient :

$$\psi(\vec{r}) := \psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3k \quad (16)$$

$$\phi(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r \quad (17)$$

$\phi(\vec{k})$ est la transformée de Fourier de $\psi(\vec{r}, 0)$

$$\phi(\vec{k}) = \mathcal{F}[\psi(\vec{r})]$$

$\psi(\vec{r}, 0)$ est la transformée inverse de Fourier de $\phi(\vec{k})$

$$\psi(\vec{r}) = \bar{\mathcal{F}}[\phi(\vec{k})]$$

$$\psi(\vec{r}, 0) \xrightarrow{\mathcal{F}} \phi(\vec{k})$$

Paquet d'onde : Transformée de Fourier

Théorème

la fonction $\psi(\vec{r})$ et sa transformée inverse de Fourier $\phi(\vec{k})$ vérifient le théorème de Parseval-Plancherel

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi(\vec{k})|^2 d^3k \quad (18)$$

On peut exprimer les expressions du paquet d'onde dans l'espace des impulsions comme suit :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \bar{\psi}(\vec{p}) e^{i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar} d^3p \quad (19)$$

avec

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar \omega$$

et $\bar{\psi}(\vec{p}) = \frac{\phi(\vec{k})}{\hbar^{3/2}}$. de la relation (19) on peut écrire :

Déplacement du paquet d'onde

vitesse de phase

Soit $\psi(x, t) = Ae^{i\varphi} = Ae^{i(kx - \omega t)}$ une onde plane monochromatique (onde de Broglie) qui se propage dans un espace à une seule dimension x . l'évolution est caractérisée par une phase φ constante :

$$\frac{d\varphi}{dt} = k \frac{dx}{dt} - \omega = 0$$

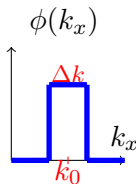
la grandeur $\frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k}$ est appelée vitesse de phase de l'onde et on la note :

$$v_{\varphi} = \frac{\omega}{k} \quad (22)$$

Vitesse de groupe

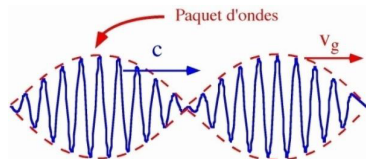
Considérons un paquet d'onde qui se propage le long de l'axe \vec{ox} :

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_x) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (23)$$



$$\phi(k_x) = \begin{cases} A & \text{si } |k_x - k_0| \leq \frac{\Delta k}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

la vitesse de la propagation
du centre du paquet d'onde :



$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= e^{-i\omega_0(\frac{x}{v_\varphi} - t)} \frac{A}{\sqrt{2\pi}} (k - k_0) \\ &\times \frac{\sin[(x - v_g t) \frac{\Delta k}{2}]}{(x - v_g t) \frac{\Delta k}{2}} \end{aligned}$$

Exercice

- ❶ Déterminer la vitesse de groupe du paquet d'onde associée à une particule libre non relativiste

-

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{p}{m} = \frac{dE}{dp}$$

Cette vitesse coïncide avec celle de la particule.

- ❷ Calculer la vitesse de phase de l'onde associée.

-

$$v_\phi = \frac{E}{p} = \frac{v_g}{2}$$

- ❸ Calculer la vitesse de phase de l'onde associée à une particule libre relativiste.

Mesure de la position de la particule quantique

Valeur moyenne de la position d'une particule quantique :

$$\langle x \rangle = \int x d\mathcal{P} = \int x |\psi(x)|^2 dx$$

Valeur moyenne de l'impulsion d'une particule quantique :

$$\langle p \rangle = \int p d\mathcal{P} = \int p |\psi(p)|^2 dp$$

La dispersion est donnée par l'écart quadratique moyen :

$$\Delta a = \sqrt{\langle a - \langle a \rangle \rangle^2}$$

on vérifie :

$$(\Delta a)^2 = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2$$

$a = x$ ou p

Principe d'incertitude de Hiesenberg

La mesure simultanée de deux grandeurs conjuguées par exemple (position et impulsion), n'est pas possible, elle est **limitée** par les inégalités de Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$$

$$\Delta y \Delta p_y \geq \hbar/2$$

$$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar/2$$

Il existe une limite inférieure qui correspond à une incertitude intrinsèque indépendamment de la précision de l'appareil de mesure ou de l'expérimentateur.

Equation de Shrodinger

- l'état de la particule quantique est déterminé par la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$
- L'évolution dans le temps de $\psi(\vec{r}, t)$ est décrite par l'équation de Schrödinger (1926)

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V \psi(\vec{r}, t)$$

avec

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Exercice

vérifier que les ondes de Broglie $A_0 e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{r} - Et)}$ sont solutions de l'équation de Schrödinger.

Equation de Schrödinger : Etat stationnaire

Si le potentiel est indépendant du temps : $V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$
 \Rightarrow **le système est dit conservation**, il existe alors des solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger.
 la fonction d'onde stationnaire :

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \quad (24)$$

$\varphi(\vec{r})$ est une fonction d'onde spatiale :

$$H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}) \quad (25)$$

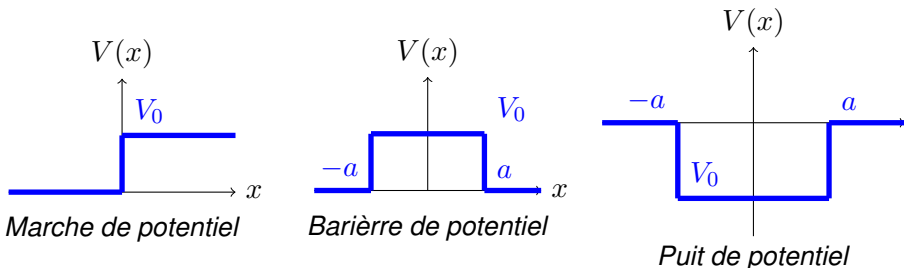
avec

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$$

est l'opérateur hamiltonien.

E sont les valeurs propres de H et $\varphi(\vec{r})$ sont les fonctions(ou états) propres de H

Résolution de l'équation de Schrödinger



Potentiel constant : $V(x) = V_0$

l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)\varphi(x) = 0 \quad (26)$$

$$\varphi''(x) + k_1^2\varphi(x) = 0 \quad (27)$$

avec $k_1^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$

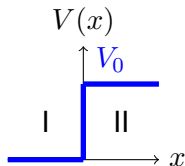
Résolution de l'équation de Schrödinger

cas $E > V_0$	cas $E < V_0$
$k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$	$\rho^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$
$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = -k^2\varphi(x)$	$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} = \rho^2\varphi(x)$
$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$	$\varphi(x) = Ce^{\rho x} + Be^{-\rho x}$

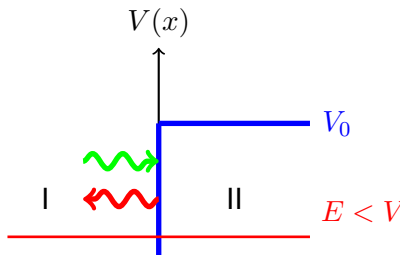
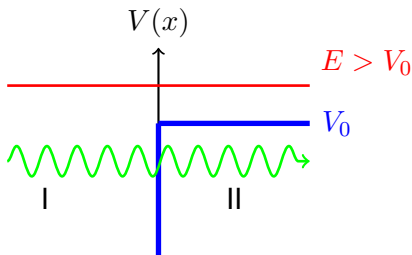
Résolution de l'équation de Shrodinger : Marche de potentiel

Une particule de masse m soumise à un potentiel de la forme :

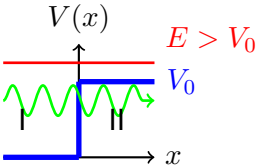
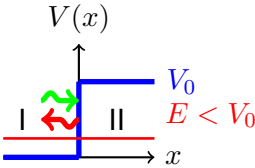
$$\begin{cases} V(x) = 0 & x < 0 \\ V(x) = V_0 & x > 0 \end{cases}$$



Marche de potentiel



Marche de potentiel : Etude Classique

 <p>$V(x)$</p> <p>$E > V_0$</p> <p>V_0</p> <p>x</p>	 <p>$V(x)$</p> <p>V_0</p> <p>$E < V_0$</p> <p>x</p>
<p>Région (I) : $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$</p> <p>Région (II) : $v = \sqrt{\frac{2(E - V_0)}{m}}$</p> <p>La particule peut franchir la barrière avec une vitesse réduite.</p>	<p>La particule ne peut pas franchir la barrière.</p>

Marche de potentiel : Etude Quantique

l'équation de Shrödinger stationnaire :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0 \quad (28)$$

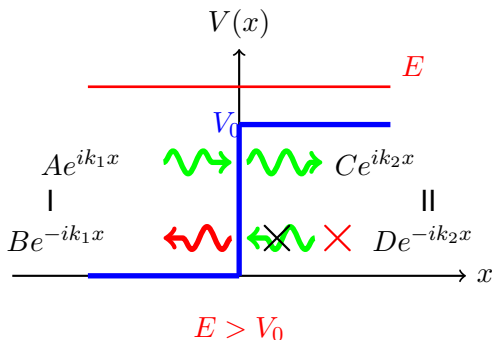
cas de $E > V_0$

Région (I)	Région (II)
$\varphi_1''(x) + k_1^2\varphi_1(x) = 0$ $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{P_1^2}{\hbar^2}$ $\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$	$\varphi_2''(x) + k_2^2\varphi_2(x) = 0$ $k_2^2 = \frac{2m(E - V)}{\hbar^2} = \frac{P_2^2}{\hbar^2}$ $\varphi_2(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$

A, B, C et D sont des constantes à déterminer

Marche de potentiel : Etude Quantique

Détermination des constantes A , B , C et D



l'onde ne peut être réfléchi de l'infini. Elle n'a pas d'existence physique $\Rightarrow D = 0$

$$\int \varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

(29)

Marche de potentiel : Etude Quantique

Détermination des constantes A , B , C et D

Les conditions de continuité :

-

- la fonction d'onde est continue aux points de discontinué : $\varphi_1(x=0) = \varphi_2(x=0)$
- la dérivée de fonction d'onde est continue aux points de discontinué : $\varphi'_1(x=0) = \varphi'_2(x=0)$

Les constantes sont reliées par les équation suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} A + B = C \\ Ak_1 - Bk_1 = Ck_2 \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{B}{A} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{array} \right. \quad (30)$$

Marche de potentiel : Etude Quantique

Coefficients de réflexion et de transmission

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}} \quad \boxed{T = \frac{|C|^2}{|A|^2} \frac{v_{g2}}{v_{g1}} = \frac{|C|^2}{|A|^2} \frac{k_2}{k_1}} \quad (31)$$

en utilisant l'équation (29) , le coefficient de transmission prend la forme suivante :

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (32)$$

On vérifie :

$$R + T = 1$$

Marche de potentiel : Etude Quantique

l'équation de Shrödinger stationnaire :

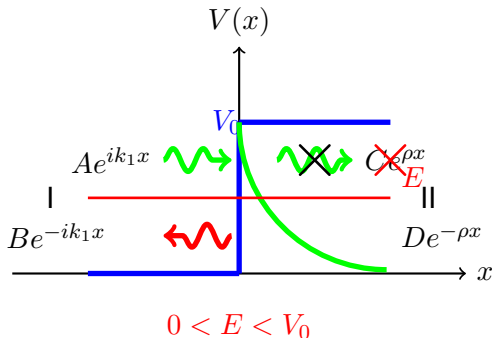
$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0 \quad (33)$$

cas de $E < V_0$

Région (I)	Région (II)
$\varphi_1''(x) + k_1^2\varphi_1(x) = 0$ $k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{P_1^2}{\hbar^2}$ $\varphi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$	$\varphi_2''(x) - \rho_2^2\varphi_2(x) = 0$ $\rho_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} = \frac{P_2^2}{\hbar^2}$ $\varphi_2(x) = Ce^{-\rho_2x} + De^{\rho_2x}$

A, B, C et D sont des constantes à déterminer

Marche de potentiel : Etude quantique $E < V_0$



ρ est positif, donc : $Ce^{\rho x} \rightarrow +\infty$ quand $x \rightarrow \infty$, c'est une Solution qui n'est pas physique, donc on peut prendre $C = 0$.

$$\begin{cases} \varphi_1(x) &= Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} \\ \varphi_2(x) &= Ce^{-\rho x} \end{cases} \quad (34)$$

Marche de potentiel : Etude quantique $E < V_0$

$$\begin{cases} \varphi_1(x) &= A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} \\ \varphi_2(x) &= D e^{-\rho x} \end{cases} \quad (35)$$

En utilisant ces conditions de raccordement, on montre que :

$$\boxed{\begin{cases} \frac{B}{A} = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho} \\ \frac{C}{A} = 0 \end{cases}} \quad (36)$$

\Rightarrow

$$\boxed{R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1} \quad \boxed{T = 0} \quad (37)$$

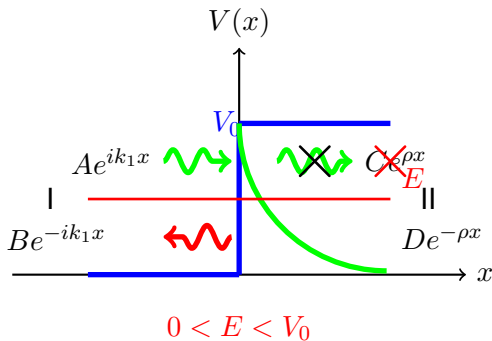
la particule a une probabilité non nulle de se trouver dans la région (II), en effet :

$$\boxed{|\varphi_2(x)|^2 = \varphi_2^*(x)\varphi_2(x) = |D|^2 e^{-2\rho x}} \quad (38)$$

En conclusion on peut dire que contrairement aux prévisions classiques

la particule quantique à une probabilité non nulle de franchir la marche de potentiel et de se retrouver dans la région (II).

Puisque, $\rho > 0$, cette probabilité décroît exponentiellement en fonction de x .



Chapitre 3 : Formalisme mathématique de la Mécanique Quantique

1. Chapitre 1 : Début de la Mécanique Quantique
2. Chapitre 2 : Mécanique Ondulatoire
3. Chapitre 3 : Formalisme mathématique de la Mécanique Quantique
4. Énoncé des postulats
 - 4.1 Postulat 1 : Description de l'état d'un système
5. Postulat 4 : Décomposition spectrale
6. Conservation de la norme
7. Définition et propriétés
8. Représentation de Schrödinger
9. Représentation de Heisenberg
10. Équation de mouvement de Heisenberg



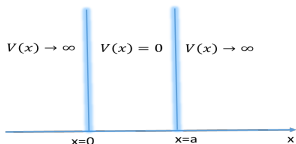
Espace des fonctions d'ondes

Une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t) \in \mathcal{L}^2$.

\mathcal{L}^2 est un espace des fonctions de carrés sommables :

$$\mathcal{L}^2 = \left\{ \psi(x) \left| \int_{\text{espace}} |\psi|^2 < \infty \right. \right\}$$

L'ensemble \mathcal{L}^2 est de dimension infinie car les valeurs prises par $\psi(\vec{r}, t)$ en un point de cette fonction sont infinies.



$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), n = 1, 2, 3, \dots$$

En physique on s'intéresse à l'ensemble $\mathcal{E} \subset \mathcal{L}^2$ des fonctions continues, dérivables,... et à support borné (en dehors duquel la fonction d'onde est nulle).



Structure de l'espace des fonctions d'onde \mathcal{E}

a. \mathcal{E} est un espace vectoriel :

si $\psi_1(x) \in \mathcal{E}$ et $\psi_2(x) \in \mathcal{E} \Rightarrow \psi(x) = \lambda_1 \psi_1(x) + \lambda_2 \psi_2(x) \in \mathcal{E}$

b. Produit scalaire sur \mathcal{E} :

$$(\phi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx \quad (39)$$

• :

$$(\phi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 (\phi, \psi_1) + \lambda_2 (\phi, \psi_2) \quad (40)$$

•

$$(\lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2, \psi) = \lambda_1^* (\phi_1, \psi) + \lambda_2^* (\phi_2, \psi) \quad (41)$$

•

$$(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^* \quad (42)$$

Bases orthonormées complètes discrètes dans \mathcal{E}

l'ensemble $\{u_i(x), i = 1, 2 \dots | u_i(x) \in \mathcal{E}\}$ détermine une base complète de \mathcal{E} si :

- i. il est orthonormé :

$$(u_i, u_j) = \int u_i^*(x) u_j(x) dx = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

- ii. il est complet si toute fonction $\psi(x)$ de \mathcal{E} peut se décomposer d'une façon unique sur $\{u_i(x), i = 1, 2 \dots\}$:

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x), \quad c_i \in \mathbb{C}$$

où les coefficients c_i sont appelées les composantes de $\psi(x)$ sur la base $\{u_i(x)\}$.

Bases orthonormées complètes discrètes

Composantes de $\psi(x)$

En effet :

$$c_i = (u_i, \psi) = \int u_i^*(x) \psi(x) dx$$

$$(u_i, \psi) = \int u_i^*(x) \sum_j c_j u_j(x) dx \quad (44)$$

$$= \sum_j c_j \int u_i^*(x) u_j(x) dx \quad (45)$$

$$= \sum_j c_j (u_i, u_j) \quad (46)$$

$$= \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i \quad (47)$$

Bases orthonormées complètes discrètes

$$\begin{aligned}
 \psi(x) &= \sum_i c_i u_i(x) = \sum_i (u_i, \psi) u_i(x) \\
 &= \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x') u_i(x) \psi(x') dx' \\
 \psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \left[\sum_i u_i^*(x') u_i(x) \right] dx'
 \end{aligned}$$

or

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x') \delta(x - x') dx'$$

$$\boxed{\sum_i u_i^*(x') u_i(x) = \delta(x - x')} \quad \text{Relation de fermeture} \quad (48)$$

Bases orthonormées complètes continue

Relation de fermeture

L'ensemble $\{v_\alpha, \alpha \in \mathbb{R}\}$ détermine une base complète de \mathcal{E} si :

Relation d'orthonormalisation :

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_\alpha^*(x) v_\beta(x) dx = \delta(\alpha - \beta) \quad (49)$$

Relation de fermeture :

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_\alpha^*(x) v_\alpha(y) d\alpha = \delta(x - y) \quad (50)$$

Toute fonction d'onde $\psi(x)$ se décompose sur la base $\{v_\alpha, \alpha \in \mathbb{R}\}$: comme suit :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c_\alpha v_\alpha(x) d\alpha \quad (51)$$

avec

$$c_\alpha = (v_\alpha, \psi)$$

Bases orthonormées complètes

Correspondance



Base discrète	Base continue
indice i	paramètre continu α
$\{u_i(x), i = 1, 2 \dots\}$	$\{v_\alpha(x), \alpha \in \mathbb{R}\}$
\sum_i	$\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha$
δ_{ij}	$\delta(\alpha - \beta)$

Bases orthonormées complètes

Exemples

"Fonctions" de Dirac centrées autour du point x_0 :

$$\xi_{x_0}(x) = \delta_{x_0}(x) = \delta(x - x_0), \quad x_0 \in \mathbb{R}$$

$\{\xi_{x_0}\}$ est une base orthonormée complète :

Relation d'orthonormalisation :

$$(\xi_{x_0}, \xi_{y_0}) = \delta(x - y)$$

Relation de fermeture :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi_{x_0}^*(x) \xi_{x_0}(y) dx_0 = \delta(x_0 - y_0)$$

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c_{x_0} \xi_{x_0} dx_0$$

$$\text{avec } c_{x_0} = (\xi_{x_0}, \psi)$$

Bases orthonormées complètes

Exemples

l'ensemble des fonctions d'ondes planes :

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i(\frac{px}{\hbar})}$$

$\{v_p, p \in \mathbb{R}\}$ est une base orthonormée complète :

Relation d'orthonormalisation :

$$(v_p, v_{p'}) = \delta(p - p')$$

Relation de fermeture :

$$\int_{-\infty}^{\infty} v_p^*(x) v_p(y) dp = \delta(y - x)$$

Notation de Dirac

Espace des états



L'espace des états quantiques, \mathbb{E} , est déterminé par les vecteurs $|\psi\rangle$ appelés kets :

$$\psi \in \mathcal{E} \longrightarrow |\psi\rangle \in \mathbb{E}$$

le ket $|\psi\rangle$ est représenté par un vecteur colonne :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (52)$$

A chaque ket $|\psi\rangle \in \mathbb{E} \longmapsto$ un bra $\langle\psi| \in \mathbb{E}^*$

le bra $\langle\psi|$ est représenté par un vecteur ligne

$$\langle\psi| = (c_1^* \quad c_2^* \quad \dots \quad c_i^* \quad \dots)$$

Il existe une correspondance entre ket et bra et cette correspondance est antilinéaire :

$$|\lambda\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda c_1 \\ \lambda c_2 \\ \lambda c_3 \end{pmatrix} \longrightarrow \langle\lambda\psi| = \begin{pmatrix} \lambda^* c_1^* & \lambda^* c_2^* & \lambda^* c_3^* \end{pmatrix} = \lambda^* \langle\psi|$$

$$\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \Rightarrow \lambda_1^* \langle\psi_1| + \lambda_2^* \langle\psi_2| \quad (53)$$

Produit scalaire dans la notation de Dirac

Le produit Scalaire de deux kets $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ est noté par :

$$\langle\phi|\psi\rangle \quad (54)$$

il vérifie les propriétés suivantes :

$$\langle\phi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1 \langle\phi|\psi_1\rangle + \lambda_2 \langle\phi|\psi_2\rangle \quad (55)$$

$$\langle\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2|\psi\rangle = \lambda_1^* \langle\phi_1|\psi\rangle + \lambda_2^* \langle\phi_2|\psi\rangle \quad (56)$$

$$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \quad (57)$$

$$\langle\psi|\psi\rangle \geq 0 \quad \text{dans ce cas on note par : } |\psi(x)| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} \quad (58)$$

Composantes d'un vecteur ket

Cas d'une base discrète

Il existe une infinité de bases orthonormées que l'on peut définir dans \mathbb{E} . Dans le cas de dimension finie, on peut construire une base $\{|u_i\rangle, i = 1, \dots, n\}$ vérifiant :

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$$

$\forall |\psi\rangle \in \mathbb{E}$, on a

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

c_i sont les coordonnées du ket $|\psi\rangle$ dans la base $\{|u_i\rangle\}$:

$$\langle u_i | \psi \rangle = \sum_{j=1}^n c_j \overbrace{\langle u_i | u_j \rangle}^{\delta_{ij}} = c_i$$

Si $|\psi\rangle = \sum_i^n a_i |u_i\rangle$ et $|\varphi\rangle = \sum_j^n b_j |u_j\rangle$

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{i,j=1}^n b_i^* a_j \langle u_i | u_j \rangle$$

Relation de fermeture

Cas d'une base discrète

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad (59)$$

$$|\psi\rangle = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle \quad (60)$$

$$|\psi\rangle = \underbrace{\sum_i |u_i\rangle \langle u_i|}_{\mathbb{I}} |\psi\rangle \quad (61)$$

$$\Rightarrow \boxed{\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = \mathbb{I}} \quad (62)$$

\mathbb{I} est la matrice unité dans \mathbb{E}

Cas d'une base continue

l'ensemble $\{|v_\alpha\rangle\}$, $\alpha \in \mathbb{R}$ détermine une base continue de \mathbb{E} si :

$$\langle v_\alpha | v_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c_\alpha |v_\alpha\rangle d\alpha \quad (63)$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle v_\alpha | \psi \rangle |v_\alpha\rangle d\alpha \quad (64)$$

$$|\psi\rangle = \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha |v_\alpha\rangle \langle v_\alpha|}_{\mathbb{I}} |\psi\rangle \quad (65)$$

$$\Rightarrow \boxed{\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha |v_\alpha\rangle \langle v_\alpha| = \mathbb{I}} \quad (66)$$

\mathbb{I} est la matrice unité dans \mathbb{E} .

Exemples : base $\{|\vec{r}_0\rangle\}$ et $\{|\vec{p}_0\rangle\}$

- relation d'orthonormalisation :

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

- relation de fermeture :

$$\iiint d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}, \quad \iiint d^3p |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| = \mathbb{1}$$

Le passage d'une base à l'autre se fait via :

$$\langle \vec{r}_0 | \vec{p}_0 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\frac{\vec{r}_0 \cdot \vec{p}_0}{\hbar}}$$

- la décomposition d'un ket $|\psi\rangle$ sur la base $|\vec{r}\rangle$ s'écrit :

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \iiint d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| \psi\rangle$$

$$\langle \vec{r} | \mathbb{1} | \psi \rangle = \iiint d^3r' \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = \iiint d^3r' \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r})$$

Exemples : base $\{|\vec{r}_0\rangle\}$ et $\{|\vec{p}_0\rangle\}$

ket $|\psi\rangle$ sur la base $|\vec{p}_0\rangle$

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}_0 | \psi \rangle &= \langle \vec{p}_0 | \mathbf{1} \psi \rangle \\ &= \iiint d^3 r_0 \langle \vec{p}_0 | \vec{r}_0 \rangle \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{or} \quad \langle \vec{r}_0 | \vec{p}_0 \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i \frac{\vec{r}_0 \cdot \vec{p}_0}{\hbar}} \\ \langle \vec{p}_0 | \psi \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \iiint d^3 r_0 e^{-i \frac{\vec{r}_0 \cdot \vec{p}_0}{\hbar}} \psi(\vec{r}_0) \\ &= TF[\psi(\vec{r}_0)] = \varphi(\vec{p}_0)\end{aligned}$$

donc

$$\boxed{\langle \vec{p}_0 | \psi \rangle = \varphi(\vec{p}_0)}$$

Bases orthonormées complètes

Correspondance

Base discrète	Base continue
indice $i = 1, 2, \dots$,	paramètre continu α
$\{ u_i\rangle, i = 1, \dots, n\}$	$\{ v_\alpha\rangle\}$
$\langle u_i u_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle v_\alpha v_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)$
$\sum_i u_i\rangle \langle u_i = \mathbb{I}$	$\int_{-\infty}^{\infty} d\alpha v_\alpha\rangle \langle v_\alpha = \mathbb{I}$

Représentation $\{ \vec{r}\rangle\}$	Représentation $\{ \vec{p}\rangle\}$
$\langle \vec{r} \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$	$\langle \vec{p} \vec{p}' \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$
$\langle \vec{r} \psi \rangle = \psi(\vec{r})$	$\langle \vec{p} \psi \rangle = \varphi(\vec{p})$

Algèbre des Opérateurs

Définition

un opérateur est une application linéaire qui transforme un état quantique dans l'espace des états \mathbb{E} :

$$A : \mathbb{E} \longrightarrow \mathbb{E} \quad (67)$$

$$|\psi\rangle \longmapsto |\psi'\rangle = A|\psi\rangle \quad (68)$$

$$A[\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle] = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle \quad (69)$$

L'ensemble des opérateurs linéaires est noté \mathcal{A} .

Représentation matricielle d'un opérateur linéaire

On associe à l'opérateur A une matrice carrée d'ordre n :

$$A = (A_{ij})_{1 \leq i, j \leq n} \quad (70)$$

avec A_{ij} sont des nombres complexes donnés par :

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x) [A u_j(x)] dx \quad (71)$$

Algèbre des Opérateurs

Propriétés

- ① Si A et B deux opérateurs linéaires on a :

$$(\lambda_1 A + \lambda_2 B) |\psi\rangle = \lambda_1 A |\psi\rangle + \lambda_2 B |\psi\rangle$$

②

$$(AB) |\psi\rangle = AB |\psi\rangle = A (B |\psi\rangle)$$

- ③ le produit des opérateurs est associatif :

$$(AB)C |\psi\rangle = A(BC) |\psi\rangle = ABC |\psi\rangle$$

- ④ En général le produit des opérateurs n'est pas commutatif :

$$(AB) |\psi\rangle \neq (BA) |\psi\rangle$$

Algèbre des Opérateurs

Propriétés

- ❶ la quantité $[A, B] = AB - BA \neq 0$ est appelée commutateur de A et B . Si $[A, B] = 0$, on dit que A et B commutent.
- ❷ $[A, \lambda B + \beta C] = \lambda [A, B] + \beta [A, C]$, λ et $\beta \in \mathbb{C}$
- ❸ $[A, BC] = B [A, C] + [A, B] C$
- ❹ $\{\mathcal{A}, [,]\}$ est une algèbre de Lie :
 - antisymétrie $[A, B] = -[B, A]$
 - identité de Jacobi :
$$[[A, B], C] + [[C, A], B] + [[B, C], A] = 0$$
- ❺ $[A, B^n] = \sum_{k=1}^n B^{n-k} [A, B] B^{k-1}$

Opérateur inverse

Soit A un opérateur linéaire qui transforme $|\psi\rangle$ en $|\psi'\rangle$,

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

S'il existe un opérateur B qui transforme $|\psi'\rangle$ en

$$|\psi\rangle = B|\psi'\rangle$$

alors

$$AB = \mathbb{I}$$

on dit que B est l'opérateur inverse de A et on note $A^{-1} = B$
on vérifie que

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

En notation matricielle cela se traduit par

$$A^{-1} = \frac{(\tilde{A})^t}{\det A}$$

avec \tilde{A} la co-matrice associée à la matrice A

Exemple

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \quad \tilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -i & -i & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}$$

$$(\tilde{A})^t = \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \frac{(\tilde{A})^t}{\det A} = \begin{pmatrix} 1 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i \end{pmatrix}$$

Opérateur adjoint

Définition

Deux opérateurs A et A^+ sont dits adjoints si et seulement si

$$\langle u_i | A | u_j \rangle^* = \langle u_j | A^+ | u_i \rangle$$

En utilisant cette définition on peut montrer que :

$$|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \Leftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi| A^+ \quad (72)$$

En effet :

$$\langle u_i | \psi' \rangle = \langle u_i | A \mathbf{1} | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle$$

En prenant le conjugué :

$$\langle u_i | \psi' \rangle^* = \langle \psi' | u_i \rangle = \sum_j \langle \psi | u_j \rangle \langle u_j A^+ | u_i \rangle = \langle \psi | \mathbf{1} A^+ | u_i \rangle$$

ce qui permet d'écrire

$$\langle \psi' | u_i \rangle = \langle \psi | \mathbf{1} A^+ | u_i \rangle$$

(73)

Propriétés

- $(A^+)^+ = A$
- $(\lambda_1 A + \lambda_2 B)^+ = \lambda_1^* A^+ + \lambda_2^* B^+$
- $(AB)^+ = B^+ A^+$

Pour écrire l'adjoint d'une expression donnée :

- Inverser l'ordre des facteurs de l'expression,
- Remplacer les kets \rangle par les \langle et les bras par les kets,
- remplacer les opérateurs par leurs adjoints et les constantes par leurs complexes conjugués

Exemple :

$$(\alpha AB |\psi\rangle \langle\phi|)^+ = \alpha^* |\phi\rangle \langle\psi| B^+ A^+$$

Opérateur hermitique

Un opérateur A est dit hermitique si :

$$A^+ = A$$

En notation matricielle cela s'écrit :

$$A_{ij}^+ = A_{ji}^*$$

Si on considère deux états $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ de l'espace \mathbb{E} , on peut montrer :

$$\langle A\psi|\phi\rangle = \langle\psi|A\phi\rangle$$

- Le produit de deux opérateurs hermitiques n'est pas nécessairement hermitique.
- Si A est un opérateur linéaire, il existe un opérateur hermitique unique H tel que

$$A = H + B$$

avec B est un opérateur linéaire

- Si $A = A^+$ est un opérateur positif alors A^2 est un

Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur

A opérateur et $|\varphi_n\rangle \in \mathbb{E}$,

$|\varphi_n\rangle$ est un vecteur propre de A avec la valeur propre λ_n si :

$$A |\varphi_n\rangle = \lambda_n |\varphi_n\rangle, \quad \lambda_n \in \mathbb{C} \quad (74)$$



Si $\lambda_n \longrightarrow |\varphi_n\rangle$

λ_n est dite une valeur propre **simple** ou **non dégénérée**.



Si $\lambda_n \longrightarrow |\varphi_n^i\rangle; i = 1, 2, \dots, g_n$

la valeur propre est dite **dégénérée**.

$$E_{\lambda_n} = \{|\varphi_n^1\rangle, \dots, |\varphi_n^{g_n}\rangle\}$$

E_{λ_n} est appelé sous espace propre de \mathbb{E} et g_n le degré de dégénérescence de λ_n .

Valeurs propres d'un opérateur

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

On calcule le déterminant :

$$\det(A - \lambda \mathbb{1}) = \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

En général on obtient :

$$\det(A - \lambda \mathbb{1}) = (\lambda - \lambda_1)^{g_1} (\lambda - \lambda_2)^{g_2} \dots (\lambda - \lambda_p)^{g_p}$$

avec g_i est le degré de dégénérescence de la valeur propre λ_i .

valeurs propres d'un opérateur hermitique

Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.

En effet :

Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre d'un opérateur hermitique A associé à la valeur propre λ_n :

$$A |\varphi_n\rangle = \lambda_n |\varphi_n\rangle \Rightarrow \langle \varphi_n | A^+ = \lambda_n^* \langle \varphi_n |$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_n | A |\varphi_n\rangle &= \lambda_n \langle \varphi_n | \varphi_n\rangle \\ \langle \varphi_n | A |\varphi_n\rangle^* &= \langle \varphi_n | A^+ |\varphi_n\rangle \\ &= \lambda_n^* \langle \varphi_n | \varphi_n\rangle \end{aligned}$$

puisque $A = A^+ \Rightarrow \lambda_n = \lambda_n^*$

vecteurs propres d'un opérateur hermitique

Deux vecteurs propres d'un opérateur hermitique associés à deux valeurs propres distinctes sont orthogonaux.

En effet :

Si $|\varphi_m\rangle$ et $|\varphi_n\rangle$ deux vecteurs propres d'un opérateur hermitique $A = A^\dagger$ associés à deux valeurs propres distinctes λ_m et λ_n :

$$A |\varphi_m\rangle = \lambda_m |\varphi_m\rangle \quad (75)$$

$$A |\varphi_n\rangle = \lambda_n |\varphi_n\rangle \quad (76)$$

$$\langle \varphi_n | A^\dagger = \langle \varphi_n | A = \lambda_n \langle \varphi_n | \quad (77)$$

multiplions (75) à gauche par $\langle \varphi_n |$ et (77) à droite par $|\varphi_m\rangle$

$$\langle \varphi_n | A |\varphi_m\rangle = \lambda_m \langle \varphi_n | \varphi_m\rangle \quad (78)$$

$$\langle \varphi_n | A |\varphi_m\rangle = \lambda_n \langle \varphi_n | \varphi_m\rangle \quad (79)$$

En retranchant membre à membre on obtient :

Observables

Une observable est un opérateur A qui vérifie :

- i. $A = A^+$
- ii. le système des vecteurs propres $\{|\varphi_n^i\rangle\}$ constitue une base :
 - $\langle \varphi_n^i | \varphi_m^j \rangle = \delta_{mn} \delta_{ij}$
 - $\sum_i \sum_m |\varphi_m^i\rangle \langle \varphi_m^i| = \mathbb{1}$

Exemple 1 :

- opérateur $\vec{R} : \vec{R} |\vec{r}\rangle = \vec{r} |\vec{r}\rangle$: avec $\vec{R} = (X, Y, Z)$ et $\vec{r} = (x, y, z)$

$$\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| d^3\vec{r} = \mathbb{1}$$

- opérateur $\vec{P} : \vec{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle$

Observables

Exemple 2 :

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de A sont :

$$\lambda_1 = -1, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = 1$$

Les vecteurs propres de A :

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_2\rangle - |u_3\rangle) \\ |\varphi_2\rangle &= |u_1\rangle \\ |\varphi_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|u_2\rangle + |u_3\rangle) \end{aligned}$$

On vérifie que

$$\bullet A = A^+$$

Exemple 2 :

$$B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de A sont :

$$\lambda = b(\text{triple})$$

Les vecteurs propres de A :

$$\begin{aligned} |\varphi_1\rangle &= |u_1\rangle \\ |\varphi_2\rangle &= |u_2\rangle \\ |\varphi_3\rangle &= |u_3\rangle \end{aligned}$$

On vérifie que

- B est une matrice diagonale à éléments dans $\mathbb{R} \implies B = B^+$
- $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$ est une base orthonormée complète.

B est une observable

Observables qui commutent

Théorème

- Si A et B sont deux observables qui commutent $[A, B] = 0$
- Si $|\varphi_n^i\rangle$ est un ket propre de A associé à a_n ,

$\Rightarrow B |\varphi_n^i\rangle$ est un ket propre de A avec la même valeur propre a_n

Théorème

- Si A et B sont deux observables qui commutent $[A, B] = 0$
- Si $A |\varphi_n^i\rangle = a_n |\varphi_n^i\rangle$ et $A |\varphi_m^j\rangle = a_m |\varphi_m^j\rangle$ avec $a_n \neq a_m$

alors

$$\langle \varphi_n^i | B | \varphi_m^j \rangle = 0$$

Ensemble Complet d'Observables qui Commutent :

Un ensemble A, B, C, \dots d'observables est appelé Ensemble Complet d'Observables qui Commutent (E.C.O.C) si :

- i. les observables commutent deux à deux :

$$[A, B] = [A, C] = [B, C] = \dots = 0.$$

- ii. La donnée des valeurs propres de tous les opérateurs A, B, C, \dots suffit de déterminer un vecteur propre commun unique (à un facteur de phase près).

Exemple 1 : une seule observable.

Soit $A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$

vp	g	\vec{vp}
0	1	$ \varphi_1\rangle = u_1\rangle$
1	1	$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2\rangle + u_3\rangle)$
-1	1	$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2\rangle - u_3\rangle)$

chaque valeur propre de A possède un vecteur propre unique, donc A forme à lui seul un ECOC.

Soit $B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow$

vp	g	\vec{vp}
b	2	$ \varphi_1\rangle = u_1\rangle$ $ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2\rangle + u_3\rangle)$
$-b$	1	$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2\rangle - u_3\rangle)$

la valeur propre b est dégénérée, l'observable B ne forme pas à lui seul un ECOC.

Exemple 2 : deux observables

Soit deux observables B et H :

$$B = \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \\ 0 & b & 0 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad H = \begin{pmatrix} E & 0 & 0 \\ 0 & -E & 0 \\ 0 & 0 & -E \end{pmatrix}$$

Observable	vp	g	$\vec{v}\vec{p}$
H	E	1	$ u_1\rangle$
	$-E$	2	$ u_2\rangle, u_3\rangle$
B	b	2	$ \varphi_1\rangle = u_1\rangle,$
	$-b$	1	$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_2\rangle + u_3\rangle)$ $ \varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(u_2\rangle - u_3\rangle)$

vp de H	vp de B	v \vec{p} s communs à H et B
$+E$	b	$ \varphi_1\rangle = u_1\rangle$
$-E$	b	$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2\rangle + u_3\rangle)$
$-E$	-b	$ \varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2\rangle - u_3\rangle)$

A Chaque couple de valeurs propres de H et B correspond un vecteur propre unique, donc l'ensemble $\{H, B\}$ est un ECOC.

1. Énoncé des postulats

Postulat 1 : Description de l'état d'un système

L'état d'un système physique quantique est déterminé, à chaque instant t , par la donnée d'un vecteur ket $|\psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états \mathcal{E} . $|\psi(t)\rangle$ est appelé vecteur d'état du système.

Toute combinaison de deux états $|\psi_1(t)\rangle$ et $|\psi_2(t)\rangle$ est aussi un état du système :

$$|\psi(t)\rangle = \alpha|\psi_1(t)\rangle + \beta|\psi_2(t)\rangle$$

1.2 Postulat 2 : Description des grandeurs physiques ou principe de correspondance I

Postulat 2 : Description des grandeurs physiques ou principe de correspondance

À toute grandeur physique mesurable A est associée un opérateur linéaire \hat{A} hermitique agissant dans l'espace des états \mathcal{E} . A est une observable.

À chaque grandeur physique A ayant un équivalent en mécanique classique, on lui associe une observable en utilisant la règle de correspondance :

Grandeur physique classique	Observable (M. Quantique)
vecteur impulsion $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$	observable $\hat{P} = (\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z) = -i\hbar\nabla$
fonction $A(\vec{r}, \vec{p})$	fonction observable $\hat{A}(\hat{R}, \hat{P})$
moment cinétique $\vec{L} = \vec{R} \wedge \vec{p}$	opérateur moment cinétique $\hat{L} = \hat{R} \wedge \hat{P}$
Énergie $E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(\vec{r})$	$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R})$

1.3 Postulat 3 : Résultat d'une mesure

Postulat 3 : Résultat d'une mesure

La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres de l'observable \hat{A} .

Si on prépare le système dans un état propre $|\varphi_n\rangle$ de l'observable \hat{A} correspondant à la valeur propre a_n , le résultat de la mesure de A est certain, c'est a_n .

Postulat 4 : Décomposition spectrale (Introduction)

La mesure d'une grandeur physique représentée par l'observable A , effectuée sur l'état quantique normalisé $|\psi\rangle$, donne comme résultat la valeur propre a_n , avec la probabilité $P(a_n)$.

Ce postulat permet de préciser les règles de prédiction des résultats de mesure d'une grandeur physique A , il permet de calculer les probabilités de mesure. On distingue deux cas :

Postulat 4 : Cas 1 - Valeurs propres non dégénérées (Décomposition)

a. Les valeurs propres a_n sont non dégénérées :

- Considérons un système physique décrit à l'instant t par le ket $|\psi\rangle$ tel que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. $|\psi\rangle$ se décompose sur la base des vecteurs propres de l'observable A :

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |\phi_k\rangle$$

Postulat 4 : Cas 1 - Valeurs propres non dégénérées (Probabilités)

a. Suite :

- Lorsque l'on mesure la grandeur physique A sur un système physique qui se trouve dans l'état $|\psi\rangle$ normé, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée a_n de l'observable A est :

$$P(a_n) = |\langle \phi_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2$$

Postulat 4 : Cas 2 - Valeurs propres dégénérées (Probabilités)

b. Les valeurs propres a_n sont dégénérées :

- Lorsque l'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ donné, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre a_n de l'observable A correspondante est donnée par :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^i | \psi \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_i^n|^2$$

Postulat 4 : Cas 2 - Valeurs propres dégénérées (Décomposition)

Suite :

- g_n est le degré de dégénérescence de a_n ,
 $\mathcal{E}_n = \{|\varphi_n^i\rangle, i = 1, \dots, g_n\}$ est un système orthonormé complet de vecteurs propres de l'observable A .
- Dans ce cas, l'état du système peut s'écrire comme une décomposition sur la base des vecteurs propres de A :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} \sum_k c_k^i |\varphi_k^i\rangle$$

Remarque

Remarque : Si l'état $|\psi\rangle$ n'est pas normé, il faut diviser les quantités précédentes par $\langle\psi|\psi\rangle$, par exemple :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|\langle\varphi_n^i|\psi\rangle|^2}{\langle\psi|\psi\rangle} = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|c_n|^2}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

Exercice

Montrer que la probabilité $P(a_n)$ est indépendante du choix de la base de \mathbb{E}_n .

Solution :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^i | \psi \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | \varphi_n^i \rangle \langle \varphi_n^i | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{P}_n | \psi \rangle$$

avec

$$\mathbf{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle \langle \varphi_n^i|,$$

le projecteur sur le sous-espace E_n .

$$\mathbf{P}_n^2 = \mathbf{P}_n$$

On obtient alors :

$$\langle \psi | \mathbf{P}_n^2 | \psi \rangle = \langle \psi | (\mathbf{P}_n \mathbf{P}_n) | \psi \rangle = \langle \mathbf{P}_n | \psi \rangle^2$$

Valeur moyenne

Valeur moyenne :

Mesurons A sur un grand nombre de systèmes physiques identiques tous dans l'état $|\psi\rangle$. Si le spectre de A est discret, la valeur moyenne de A dans l'état $|\psi\rangle$ est donnée par :

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n a_n P(a_n) = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (4.2)$$

L'écart quadratique est alors :

$$\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2 \quad (4.3, 4.4)$$

Si $|\psi\rangle$ est vecteur propre de A , alors $\Delta A^2 = 0$.

Cas continu non dégénéré : Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ normé, la probabilité dP_α d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ vaut :

$$dP_\alpha = |\langle \alpha | \psi \rangle|^2$$

Postulat 5 : Réduction du paquet d'onde (1/2)

Postulat 5 : Réduction du paquet d'onde

Si la mesure de l'observable A sur le système dans l'état $|\psi\rangle$ donne la valeur propre a_n , alors l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normalisée de $|\psi\rangle$, soit :

$$|\psi'\rangle = \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$$

où P_n est l'opérateur projecteur sur les états propres associés à la valeur propre a_n .

a. Si a_n est non dégénérée : $P_n = |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|$, l'état du système après la mesure sera :

$$|\psi'\rangle = \frac{|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\psi\rangle}} = |\varphi_n\rangle$$

Donc, si a_n est non dégénérée, l'état du système après la mesure est un vecteur propre $|\varphi_n\rangle$.

Postulat 5 : Réduction du paquet d'onde (2/2)

b. Si a_n est dégénérée : $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_i^n\rangle\langle\varphi_i^n|$, l'état du système après la mesure sera :

$$|\psi'\rangle = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} c_i |\varphi_i^n\rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |\langle\varphi_i^n|\psi\rangle|^2}} = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} c_i |\varphi_i^n\rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_i|^2}}$$

où $c_i = \langle\varphi_i^n|\psi\rangle$ représente les coefficients de la décomposition de $|\psi\rangle$ sur la base des vecteurs propres $|\varphi_i^n\rangle$.

Postulat 6 : Évolution temporelle des états

Postulat 6 : Évolution temporelle des états

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ d'un système physique est déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (4.5)$$

avec H l'observable associée à l'énergie totale du système, appelé opérateur hamiltonien. Cet opérateur dépend, en général, du temps.

Dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, l'hamiltonien d'une particule soumise à un potentiel s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{R}) \quad (4.6)$$

L'équation de Schrödinger est l'équation dynamique de la mécanique quantique.

Postulat 6 : Évolution temporelle des états

Postulat 6 : Évolution temporelle des états

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ d'un système physique est déterminée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (4.5)$$

avec H l'observable associée à l'énergie totale du système, appelé opérateur hamiltonien. Cet opérateur dépend, en général, du temps.

Dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, l'hamiltonien d'une particule soumise à un potentiel s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{R}) \quad (4.6)$$

L'équation de Schrödinger est l'équation dynamique de la mécanique quantique.

Contenu physique de l'équation de Schrödinger

Conservation de la norme :

La norme du vecteur d'état d'un système reste constante au cours du temps. En effet, on montre que :

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle = 0$$

Démonstration :

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle = \left(\frac{d}{dt}\langle\psi|\right)|\psi\rangle + \langle\psi|\left(\frac{d}{dt}|\psi\rangle\right)$$

En utilisant l'équation de Schrödinger :

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

et sa conjuguée, on obtient :

Évolution d'un système physique conservatif

Système physique conservatif :

Si le système physique est conservatif, son hamiltonien H ne dépend pas explicitement du temps. Les états propres de H sont donnés par :

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

où E_n détermine les différents niveaux d'énergie du système. Les états propres $|\varphi_n\rangle$ forment une base orthonormée complète, donc tout état $|\psi(t)\rangle$ peut s'écrire :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle, \quad c_n(t) \in \mathbb{C}$$

Projection et équation différentielle

Projection de l'équation de Schrödinger :

En projetant l'équation de Schrödinger sur la base $\{|\varphi_n\rangle\}$, on obtient :

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

En insérant la relation de fermeture, on trouve :

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m \langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle c_m(t)$$

Comme H est diagonal dans cette base :

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t)$$

On obtient une équation différentielle dont la solution est donnée par :

$$c_n(t) = c_n(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}$$

Solution et forme finale

En remplaçant $c_n(t)$ dans l'expression de $|\psi(t)\rangle$, on obtient :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

Conclusion :

À l'instant initial $t = t_0$, l'état du système est décrit par le ket $|\psi(t_0)\rangle$. On peut alors écrire :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle \varphi_n | \psi(t_0) \rangle e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

Remarque : États propres de H

Si l'état initial $|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_k\rangle$ est un état propre de H avec la valeur propre E_k , alors :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \delta_{kn} e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle$$

Propriétés :

- $|\psi(t)\rangle$ et $|\psi(t_0)\rangle$ sont physiquement indiscernables : ils ne diffèrent que par un facteur de phase.
- Les propriétés physiques d'un système dans un état propre de H ne varient pas au cours du temps.
- Les états propres de H sont appelés **états stationnaires**.

Remarque : États propres de H

Si l'état initial $|\psi(t_0)\rangle = |\varphi_k\rangle$ est un état propre de H avec la valeur propre E_k , alors :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \delta_{kn} e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_k(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle$$

Propriétés :

- $|\psi(t)\rangle$ et $|\psi(t_0)\rangle$ sont physiquement indiscernables : ils ne diffèrent que par un facteur de phase.
- Les propriétés physiques d'un système dans un état propre de H ne varient pas au cours du temps.
- Les états propres de H sont appelés **états stationnaires**.

Évolution de la valeur moyenne

Valeur moyenne d'une observable :

La valeur moyenne d'une observable A dans l'état $|\psi(t)\rangle$ est donnée par :

$$\langle A_t \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

Théorème 3 :

L'évolution de la valeur moyenne d'une observable A au cours du temps est régie par :

$$\frac{d}{dt} \langle A_t \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

Démonstration du théorème

Démonstration :

$$\frac{d}{dt}\langle A_t \rangle = \frac{d}{dt}\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

En appliquant la règle de Leibniz :

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

En utilisant l'équation de Schrödinger :

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

On réécrit :

$$\frac{d}{dt}\langle A_t \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | [A, H] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

Ce résultat constitue le **théorème d'Ehrenfest**.

Application aux observables de position et d'impulsion

Hamiltonien du système :

Considérons le cas d'une particule sans spin soumise à un potentiel scalaire et stationnaire $V(\vec{R})$. Le hamiltonien du système est donné par :

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

Évolution des valeurs moyennes :

L'évolution des valeurs moyennes des observables \vec{R} et \vec{P} est régie par le théorème de d'Ehrenfest :

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{R}\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{R}, H]\rangle_t + \left\langle\frac{\partial\vec{R}}{\partial t}\right\rangle_t$$

Analyse des commutateurs et évolution de $\langle \vec{R} \rangle_t$

Indépendance temporelle des observables :

Les observables \vec{R} et $V(\vec{R})$ ne dépendent pas explicitement du temps, donc :

$$\frac{\partial \vec{R}}{\partial t} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} = 0$$

Commutateurs :

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

Le second terme est nul car $V(\vec{R})$ dépend uniquement de \vec{R} , donc :

$$[\vec{R}, H] = \frac{1}{2m} [\vec{R}, \vec{P}^2]$$

En développant $[\vec{R}, \vec{P}^2]$, on obtient :

Évolution de $\langle \vec{P} \rangle_t$

Calcul du commutateur $[\vec{P}, H]$:

De même, on montre que :

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

Le premier terme est nul, donc :

$$[\vec{P}, H] = -i\hbar \frac{\partial V(\vec{R})}{\partial \vec{R}}$$

ou encore :

$$[\vec{P}, H] = -i\hbar \nabla_{\vec{R}} V(\vec{R})$$

Conclusion :

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{P} \rangle_t = - \langle \nabla_{\vec{R}} V(\vec{R}) \rangle_t$$

où $\nabla_{\vec{R}} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial z} \right)$ est le gradient

Remarque : Analogies avec les équations de Newton

Analogie quantique des équations de Newton :

Les expressions (4.29) et (4.33) sont l'analogie quantique des équations de Newton pour les valeurs moyennes.

Dans le cas classique, on a :

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} = \vec{v} \quad (4.34)$$

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\nabla_{\vec{r}} V(\vec{r}) = \vec{F} \quad (4.35)$$

où \vec{F} est la force qui dérive du potentiel $V(\vec{r})$.

Opérateur d'évolution $U(t, t_0)$

Définition :

L'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$ permet de déterminer l'état d'évolution $|\psi(t)\rangle$ d'un système physique à partir de son état initial $|\psi(t_0)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (4.36)$$

Propriétés :

L'opérateur $U(t, t_0)$ est solution de l'équation de Schrödinger.
En effet :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (4.37)$$

donc :

$$i\hbar \frac{d}{dt} [U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle] = H(t) [U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle] \quad (4.38)$$

Propriétés de l'opérateur d'évolution $U(t, t_0)$

Solution de l'équation différentielle :

Si le hamiltonien $H(t) = H$ est indépendant du temps, l'équation (4.39) s'intègre pour donner :

$$U(t, t_0) = C e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \quad (4.40)$$

À $t = t_0$, on a $C = U(t_0, t_0) = 1$, donc :

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \quad (4.41)$$

Propriétés :

- **Conservation de la norme** : L'opérateur $U(t, t_0)$ est un opérateur unitaire :

$$U(t, t_0)^\dagger = U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t)$$

Représentation de Schrödinger et de Heisenberg

Évolution dans la représentation de Schrödinger :

Dans la représentation de Schrödinger, les opérateurs sont constants, mais les états $|\psi_S(t)\rangle$ évoluent dans le temps selon l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_S(t)\rangle = H |\psi_S(t)\rangle \quad (4.42)$$

L'évolution peut être décrite à l'aide de l'opérateur $U(t_0, t)$:

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t_0, t) |\psi_S(t_0)\rangle$$

Observables dans cette représentation :

Dans la description de Schrödinger, l'observable A_S ne dépend pas du temps, $\frac{\partial A_S}{\partial t} = 0$.

Représentation de Heisenberg

Valeur moyenne d'une observable :

La valeur moyenne d'une observable A_S s'écrit :

$$\langle A \rangle = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle \quad (4.44)$$

$$= \langle \psi_S(t_0) | U(t, t_0)^\dagger A_S U(t, t_0) | \psi_S(t_0) \rangle \quad (4.45)$$

Définition de l'opérateur de Heisenberg :

On définit l'opérateur de Heisenberg A_H par :

$$A_H = U(t, t_0)^\dagger A_S U(t, t_0) \quad (4.46)$$

Ainsi, la valeur moyenne de l'observable A_H dans la représentation de Heisenberg s'écrit :

$$\langle A \rangle = \langle \psi_H(t) | A_H | \psi_H(t) \rangle \quad (4.47)$$

Équation de mouvement de Heisenberg

Équation de Heisenberg :

Une observable A_H en représentation de Heisenberg satisfait à l'équation suivante :

$$\frac{d}{dt}A_H = \frac{1}{i\hbar}[A_H, H_H] + \left(\frac{\partial A_S}{\partial t}\right)_H \quad (4.49)$$

Démonstration :

Voir TD.

Sources principales :

- David J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, second edition, Addison–Wesley, 2004.
- Albert Messiah, *Mécanique quantique*, 1995.
- Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard, *Mécanique quantique*. Éditions de l'École polytechnique. 2002.