

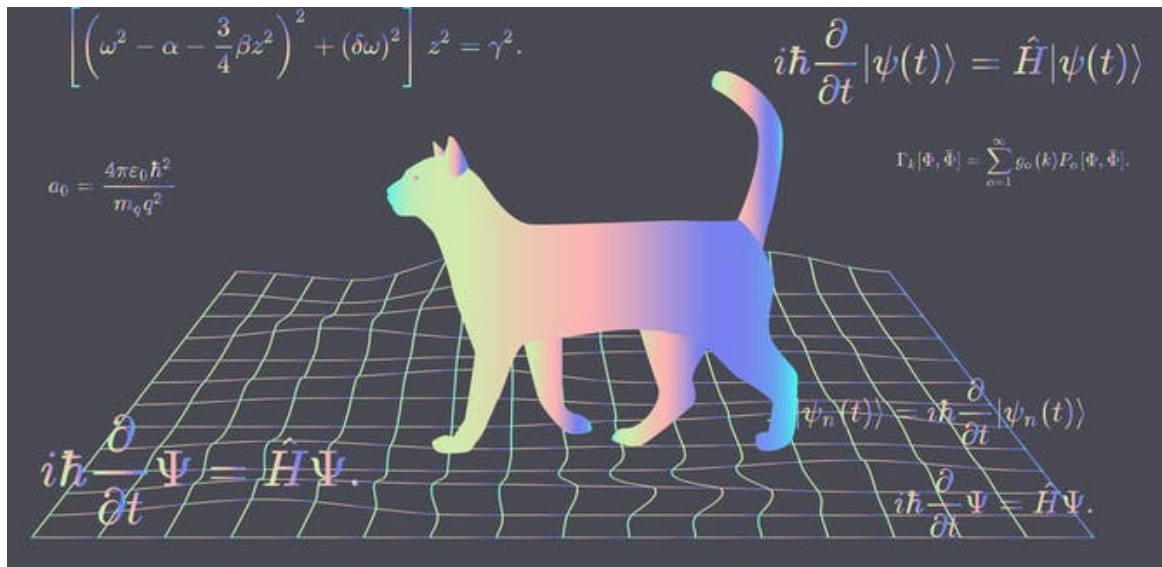
# PHYS-F203 - Introduction à la Mécanique Quantique

Basé sur les notes de Prof. Serge MASSAR

MOEIL Juian

ABDUL SATER Sami

Année académique 2020-2021



UNIVERSITÉ LIBRE DE BRUXELLES

ULB

# Table des matières

<b>I</b>	<b>Principe d'incertitude d'Heisenberg</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Applications du Principe d'Incetitude</b>	<b>1</b>
1.1	Application à l'atome d'Hydrogène . . . . .	1
1.2	Application à l'Oscillateur Harmonique . . . . .	2
1.3	Application au cas relativiste . . . . .	2
1.4	Application à la Masse de Planck . . . . .	2
1.5	Application à la masse des étoiles . . . . .	3
1.6	Masse de Chandrasekhar . . . . .	3
<b>II</b>	<b>L'équation de Schrödinger</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Particule libre</b>	<b>6</b>
<b>3</b>	<b>Interprétation probabiliste</b>	<b>6</b>
3.1	Born : étude des collisions. Origine de l'interprétation probabiliste . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Paquet d'onde à une dimension</b>	<b>7</b>
4.1	Vitesse de phase et vitesse de groupe . . . . .	7
<b>5</b>	<b>Potentiel stationnaire</b>	<b>10</b>
5.1	Equation de Schrödinger indépendante du temps . . . . .	10
5.2	Potentiels à une dimension : description quantitative . . . . .	10
5.2.1	Puit de potentiel infini à une dimension . . . . .	11
5.2.2	Puit de potentiel fini à une dimension . . . . .	11
5.2.3	Potentiel en escalier . . . . .	12
<b>6</b>	<b>Approximation semi-classique</b>	<b>13</b>
6.1	Application à la désintégration alpha des noyaux . . . . .	14
<b>III</b>	<b>Notions mathématiques</b>	<b>15</b>
<b>7</b>	<b>Série de Fourier</b>	<b>15</b>
<b>8</b>	<b>Transformées de Fourier</b>	<b>15</b>
<b>9</b>	<b>Distribution</b>	<b>16</b>
9.1	Espace de fonctions test . . . . .	16
9.2	Opérations sur les distributions . . . . .	16
9.3	Distributions tempérées . . . . .	16
9.4	$\delta$ de Dirac . . . . .	16
9.5	Transformée de Fourier d'une fonction périodique . . . . .	17
<b>IV</b>	<b>Formalisme de Dirac</b>	<b>18</b>
<b>10</b>	<b>Expérience de Stern-Gerlach</b>	<b>18</b>
<b>11</b>	<b>Notations propre à la Mécanique Quantique</b>	<b>19</b>
11.1	Correspondance entre bra et ket . . . . .	19
11.1.1	Exemples . . . . .	19
<b>12</b>	<b>Opérateurs linéaires</b>	<b>19</b>
<b>13</b>	<b>Opérateur adjoint <math>A^\dagger</math></b>	<b>20</b>
13.1	Propriétés intéressantes . . . . .	20
13.2	Exemples d'opérateurs . . . . .	20

<b>14 Opérateur Hermitien et observable</b>	<b>21</b>
14.1 Equation aux vecteurs propres . . . . .	21
14.2 Exemples d'opérateurs . . . . .	21
<b>V Postulats de la Mécanique Quantique</b>	<b>22</b>
<b>15 Énoncé des postulats</b>	<b>22</b>
15.1 Valeur moyenne d'une observable $\mathcal{A}$ . . . . .	23
15.2 Ecart quadratique moyen . . . . .	23
15.3 Evolution des systèmes dans le temps . . . . .	23
15.4 Réduction du paquet d'onde . . . . .	24
15.5 Hamiltonien indépendant du temps . . . . .	24
15.6 Opérateurs unitaires . . . . .	25
<b>16 Fonction d'Opérateurs/de matrices</b>	<b>26</b>
<b>VI Applications de la Mécanique Quantique</b>	<b>27</b>
<b>17 Interféromètre de Mech-Zehnder</b>	<b>27</b>
17.1 Lumière classique . . . . .	27
17.2 Lumière quantique . . . . .	28
<b>18 Oscillations de neutrinos</b>	<b>28</b>
<b>19 MASER <math>NH_3</math></b>	<b>28</b>
<b>20 Spin <math>\frac{1}{2}</math></b>	<b>28</b>
20.1 Quantification du moment angulaire . . . . .	29
<b>VII Représentations de la position et de l'impulsion en Mécanique Quantique</b>	<b>30</b>
<b>VIII Appendice</b>	<b>31</b>
<b>A Résultats élémentaires d'Algèbre Linéaire</b>	<b>31</b>

## Résumé

*Ces notes traitent de l'interprétation de Copenhague de la Mécanique Quantique. De plus, le symbole  $\doteq$  sera intensément employé, pour signifier "par définition". Finalement, les vecteurs seront indiqués en gras, selon  $\vec{x} \doteq \mathbf{x}$ .*

## Première partie

# Principe d'incertitude d'Heisenberg

Empiriquement, il est impossible de déterminer à la fois la position  $x$  et l'impulsion  $p$  d'une particule au delà d'une certaine précision

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (\text{I.1})$$

où  $\Delta x, \Delta p$  sont les **écart-types** des grandeurs liées. Il s'agit de l'Incertainité de Heisenberg.

Nous avons donc que pour tout état quantique,  $x$  et  $p$  sont incertains : leurs incertitude obéissent à la relation I.1. Cela est liée au caractère probabiliste de la Mécanique Quantique : chaque résultat d'une mesure est aléatoire.

Notons la relation de longueur d'onde de Broglie :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (\text{I.2})$$

## 1 Applications du Principe d'Incertainité

Les différents calculs qui vont suivre servent à déterminer un ordre de grandeur : nous ne prêtons pas attention aux constantes multiplicatives tel que le facteur  $\frac{1}{2}$  devant I.1.

### 1.1 Application à l'atome d'Hydrogène

Empiriquement, nous trouvons que l'énergie d'un atome d'hydrogène sera donné par la relation

$$E = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \quad (\text{I.3})$$

Où  $e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$ .

Or, nous avons que l'électron de l'atome sera confiné dans une zone de rayon  $r$ . Dès lors, en utilisant I.1, nous aurons que  $\Delta p \approx \frac{\hbar}{r}$ . Dès lors,

$$E \approx \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \quad (\text{I.4})$$

Il suffit alors de dériver cette dernière pour obtenir l'énergie minimale :

$$\begin{aligned} E_{min} &= \frac{d}{dr} \left( \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{r} \right) = 0 \\ &= -\frac{2\hbar^2}{2mr^3} + \frac{e^2}{r^2} = 0 \\ &= \frac{1}{r^2} \left[ e^2 - \frac{\hbar^2}{mr} \right] = 0 \end{aligned}$$

Il s'ensuit dès lors que

$$r = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad E_{min} = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

Nous pouvons en déduire la valeur du **rayon de Bohr** - soit la distance séparant, dans l'atome d'hydrogène, le proton de l'électron. Il s'agit donc d'un ordre de grandeur du rayon des atomes. Il correspond à

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (\text{I.5})$$

Similairement, nous avons l'énergie de liaison de l'atome d'Hydrogène - également appelée **énergie de Rydberg** :

$$R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (\text{I.6})$$

Nous pouvons retrouver les états liés en suivant

$$E_n = -R_y \frac{1}{n^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (\text{I.7})$$

Où  $n = 1, 2, 3, \dots$

## 1.2 Application à l'Oscillateur Harmonique

Soit  $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$ . Posons  $w = \sqrt{\frac{k}{m}}$ , la fréquence angulaire. Par définition, l'état fondamental est de longueur  $\Delta x$ . Dès lors, I.1 nous implique que l'impulsion est donnée par  $\Delta p = \frac{\hbar}{\Delta x}$ . En partant de là,

$$E(\Delta x) = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} + \frac{1}{2}k\Delta x^2 \quad (\text{I.8})$$

En dérivant cette dernière équation, nous avons que le minimum d'énergie est donnée en  $\Delta x \approx \frac{\hbar^{\frac{1}{2}}}{(mk)^{\frac{1}{4}}}$ . Cela implique que

$$E_{min} \approx \sqrt{\frac{k}{m}} \hbar \approx w \hbar \quad (\text{I.9})$$

La relation exacte correspond effectivement. En effet :

$$E_n = \hbar w \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (\text{I.10})$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar w \quad (\text{I.11})$$

Notons que cette dernière est ce que nous appelons l'**énergie de point zéro**.

## 1.3 Application au cas relativiste

L'incertitude d'Heisenberg est également valide dans le cas relativiste. La relation de dispersion nous donne que  $E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2$  pour une particule libre relativiste. En posant  $\Delta x \approx \frac{\hbar}{mc}$ , nous avons que  $\Delta p \approx mc$  : il s'agit d'une particule relativiste. Dès lors,

- L'incertitude sur l'énergie sera de l'ordre  $\Delta E \approx mc^2$ .
- Supposons que nous avons un électron  $e(-)$  dans une boîte de taille  $\approx \frac{\hbar}{mc}$ . L'incertitude sur l'énergie permet alors de créer des paires d'électrons et de positrons. **La notion de particule perd son sens dans le cadre de la mécanique quantique relativiste.** Cette taille est appelée à longueur d'onde de Compton, et vaut exactement  $\lambda_C = \frac{\hbar}{mc}$ .

## 1.4 Application à la Masse de Planck

Considérons une particule de masse  $M$  confinée dans une boule de rayon  $R$ . Nous avons alors plusieurs longueurs caractéristiques intéressantes.

1. **Première longueur caractéristique.** La longueur de Compton :  $\lambda_C = \frac{\hbar}{Mc}$ .
2. **Seconde longueur caractéristique.** Le rayon de Schwarzschild :  $R_S = \frac{2GM}{c^2}$ . Il s'agit du rayon que doit prendre un objet de masse  $M$  pour devenir un trou noir ; c'est à dire dont la vitesse de libération est de l'ordre  $c$ .

La masse de Planck est alors donnée par la relation  $M_{Pl} = \sqrt{\frac{\hbar c}{G}}$ . En particulier, nous avons que :

- Si  $M < M_{Pl}$ , alors  $\lambda_C > R_S$  : nous avons une particule élémentaire.
- Si  $M > M_{Pl}$ , nous aurons un trou noir.
- Si  $M \approx M_{Pl}$ , nous ne connaissons pas la nature de l'objet.

## 1.5 Application à la masse des étoiles

Soit  $N$  le nombre d'atomes d'hydrogène dans une boule de rayon  $R$ , soumis à l'attraction gravitationnelle. Le volume par atome est de l'ordre  $\frac{R^3}{N}$ . A partir de là, nous pouvons déduire :

- **Le rayon de confinement de chaque électron et proton.**  $\Delta x_e = \Delta x_p = \frac{R}{N^{\frac{1}{3}}}$ .
- **Le moment de ces mêmes électrons et protons**<sup>1</sup>.  $\Delta p_e = \Delta p_p = \frac{\hbar N^{\frac{1}{3}}}{R}$ .

De ces relations, nous pouvons écrire les énergies cinétiques et gravitationnelle de l'objet :

$$\begin{array}{cc} \text{Energie cinétique} & \text{Energie gravitationnelle} \\ N \left( m_e c^2 + \frac{1}{2} \frac{\Delta p_e^2}{m_e} + m_p c^2 + \frac{1}{2} \frac{\Delta p_p^2}{m_p} \right) & -G \frac{(Nm_p)^2}{R} \end{array}$$

Notons que nous négligeons le dernier terme de l'énergie cinétique : de fait,  $m_p \gg m_e$ . Dès lors, l'énergie sera donnée par

$$E(R) \approx -G \frac{(Nm_p)^2}{R} + Nm_e c^2 + Nm_p c^2 + \frac{N}{2m_e} \frac{\hbar^2 N^{\frac{2}{3}}}{R^2} \quad (\text{I.12})$$

Dès lors, l'énergie sera minimum en  $R^* \approx \frac{\hbar^2}{Gm_p^2 m_e N^{\frac{1}{3}}}$ . Remarquons que lorsque le nombre de particules  $N$  augmente,  $R^*$  diminue.

Quand est-ce que les électrons deviennent relativistes ? Remarquons que  $\Delta p_e \approx cm_e = \frac{\hbar N^{\frac{1}{3}}}{R^*} = \frac{Gm_e m_p^2 N^{2/3}}{\hbar}$ . Nous pouvons en déduire que

$$N = \left( \frac{M_{Pl}}{m_p} \right)^3 \quad (\text{I.13})$$

Lorsque les particules deviennent relativistes, les réactions nucléaires deviennent possibles. Nous avons donc de la fusion nucléaire, ce qui donne une étoile !

Dans une première approximation, nous aurons alors que la masse d'une étoile est donnée par

$$M \approx m_p N \approx m_p \left( \frac{M_{Pl}}{m_p} \right)^3 \quad (\text{I.14})$$

Donner les ordres de grandeur de ces nombres.

$$\begin{array}{cc} \text{Masse de Planck} & \text{Masse d'un proton} \\ M_{Pl} \approx 10^{19} \frac{GeV}{c^2} & m_p \approx 1 \frac{GeV}{c^2} \end{array}$$

Dès lors,  $M_\odot \approx 10^{57} \frac{GeV}{c^2}$ . La valeur exacte est de  $1.0410^{57} \frac{GeV}{c^2}$ .

Nous estimons les plus petites étoiles à  $M \approx 0.08 M_\odot$ , et les plus grandes à  $M \approx 100 M_\odot$ .

## 1.6 Masse de Chandrasekhar

Reprenons  $E(R)$  pour  $N$  atomes d'hydrogènes dans une boule de rayon  $R$ , à température nulle et en tenant compte les effets relativistes.

$$E(R) \approx -\frac{GN^2 m_p^2}{R} + Nm_p c^2 + N \sqrt{m_e^2 c^4 + \frac{\hbar^2 N^{2/3}}{R^2} c^2} \quad (\text{I.15})$$

Soit  $N^*$  une valeur limite. Lorsque  $N = N^*$  :

$$\lim_{R \rightarrow 0} E(R) = 0 \quad (\text{I.16})$$

$$\lim_{R \rightarrow 0} -\frac{GN^2 m_p^2}{R} + \frac{N^{\frac{4}{3}} \hbar c}{R} = 0 \quad (\text{I.17})$$

$$N^* = \left( \frac{\hbar c}{G m_p^3} \right) = \frac{M_{Pl}^3}{m_p^3} \quad (\text{I.18})$$

A température nulle, si  $N > \frac{M_{Pl}^3}{m_p^3} = N^*$ , alors la boule ne peut pas résister à son attraction gravitationnelle : elle se collapse en un trou noir.

La masse limite à la masse de Chandrasekhar : elle vaut approximativement  $1.4 M_\odot$ . Il s'agit de l'origine des trous noirs et des supernovae.

---

1. A partir de I.1.

## Résumé du chapitre

Formules.

## Deuxième partie

# L'équation de Schrödinger

Commençons par rappeler les relations de **Plank-Einstein** :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (\text{II.1})$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (\text{II.2})$$

Où  $\lambda = \frac{2\pi}{\|\mathbf{k}\|} = \frac{h}{\|\mathbf{p}\|}$  : il s'agit de la relation de L. de Broglie, reflétant la dualité onde-corpusculaire de la matière.

Rappelons également l'équation d'onde :

$$\left( \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right) A(t, \mathbf{x}) = 0 \quad (\text{II.3})$$

En particulier, une onde plane<sup>2</sup> s'exprime par le champ scalaire

$$A(t, \mathbf{x}) = A_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad (\text{II.4})$$

Appliquons l'équation d'une onde plane ?? à l'équation de D'Alembert II.3. En particulier, notons que

$$\frac{1}{c^2} \partial_t A(t, \mathbf{x}) = \frac{-iA_0\omega}{c^2} e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})} \quad \frac{1}{c^2} \partial_t^2 A(t, \mathbf{x}) = -A_0 \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})}$$

Rappelons que nous considérons une onde plane : supposons que celle-ci se déplace dans la direction des x. Alors,

$$\partial_x A(t, x) = iA_0 k_x e^{-i(\omega t - x k_x)} \quad \partial_x^2 A(t, x) = -A_0 k_x^2 e^{-i(\omega t - x k_x)}$$

Où  $k_x$  est la composante en x du vecteur  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ . En combinant ces résultats (et en gardant l'hypothèse d'une onde se dirigeant selon l'axe des x), nous obtenons que

$$\left( \frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right) A(t, x) = 0 \quad (\text{II.5})$$

$$-A_0 \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 e^{-i(\omega t - x k_x)} + A_0 k_x^2 e^{-i(\omega t - x k_x)} = 0 \quad (\text{II.6})$$

$$\left( \frac{\omega}{c} \right)^2 - k_x^2 = 0 \quad (\text{II.7})$$

A partir de là<sup>3</sup>, nous pouvons montrer que

$$\omega = \frac{i}{A} \partial_t (A) \quad (\text{II.8})$$

$$k_x = -\frac{i}{A} \partial_x (A) \quad (\text{II.9})$$

Ce qui implique les relations

$$k_x^2 = -\frac{1}{A} \partial_x^2 A \quad \text{et} \quad k^2 = -\frac{1}{A} \Delta A$$

On pose également les quelques relations suivantes

$$E = \frac{i\hbar}{\Psi} \partial_t \Psi \quad p_x = -\frac{i\hbar}{\Psi} \partial_x \Psi \quad p^2 = -\frac{\hbar^2}{\Psi} \Delta \Psi$$

Dans le cas d'une particule relativiste, l'énergie respecte la relation de dispersion. En particulier, cela implique

$$-\hbar \partial_t \Phi + c^2 \hbar^2 \Delta \Phi - c^4 m^2 \Phi = 0 \quad (\text{II.10})$$

Il s'agit de l'équation de Klein-Gordon. Nous pouvons obtenir une relation similaire dans le cas non-relativiste. Effectivement, nous avons alors que l'énergie est donnée par la relation

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \quad (\text{II.11})$$

Dès lors, nous obtenons l'équation de Schrödinger pour une particule :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r}, t) \Psi \doteq H \Psi \quad (\text{II.12})$$

2. Une onde est dite plane si et seulement si elle ne s'exprime que dans une seule direction.

3. Demander à Prof. d'élaborer les détails.



**Note.** Nous avons alors que l'opérateur  $H \doteq -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}, t)$ . Remarquons que :

- L'équation de Schrödinger est linéaire<sup>4</sup> et satisfait les relations de Broglie.
- L'opérateur  $H$  est hermitien ; cela garantit la conservation de la probabilité, que ses valeurs propres sont réelles et que ses vecteurs propres constituent une base de l'espace considéré.

## 2 Particule libre

Dans une première approximation, supposons que le potentiel  $V(\mathbf{r}, t)$  soit nul. L'équation de Schrödinger (II.12) se réduit alors à  $i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi$ . De plus, l'énergie s'exprime alors par  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Cette équation différentielle admet visiblement des solutions de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = Ce^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} \quad (\text{II.13})$$

Où  $C$  est une constante, et  $\omega = \frac{\hbar\|\mathbf{k}\|^2}{2m}$ . Par la principe de superposition, toute combinaison linéaire d'ondes planes vérifiant l'expression de  $\omega$  sera également une solution de II.13. La solution générale est alors donnée par

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d^3k g(\mathbf{k}) e^{-i\omega t + \mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (\text{II.14})$$

Où  $g(\mathbf{k})$  est la transformation de Fourier de  $\Psi(\mathbf{r}, t=0)$  :

$$g(\mathbf{k}, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \Psi(\mathbf{r}, 0) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} d\mathbf{x} \quad (\text{II.15})$$

## 3 Interprétation probabiliste

Soit  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  une solution de (II.12). Nous pouvons vérifier que  $\Psi$  est normalisée : effectivement,  $\int d\mathbf{r} \|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2 = 1$ . Il est possible de montrer que si c'est le cas à un instant donné, ça l'est à tout moment.

Posons donc que  $\rho(\mathbf{r}, t) = \|\Psi(\mathbf{r}, t)\|^2 = \bar{\Psi}\Psi$  la densité de probabilité de trouver la particule en  $\mathbf{r}$  à l'instant  $t$ .

**Proposition 3.1.** *La densité de probabilité telle que nous venons de la définir respecte l'équation de continuité*

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0 \quad (\text{II.16})$$

Où  $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \doteq \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \bar{\Psi} \nabla \Psi - \Psi \nabla \bar{\Psi} \right\} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\bar{\Psi} (\nabla \Psi)]$  est un courant de probabilité.

*Démonstration.* Puisque  $\Psi$  est hermitique,

$$\hat{H}\Psi = \hat{H}\bar{\Psi} \quad (\text{II.17})$$

$$i\hbar\partial_t\bar{\Psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\Psi} + V\bar{\Psi} \quad i\hbar\partial_t\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi \quad (\text{II.18})$$

De plus, par définition,

$$\rho = \|\Psi\|^2 = \Psi\bar{\Psi} \quad (\text{II.19})$$

En dérivant  $\rho$  par rapport à au temps et en multipliant par  $i\hbar$ ,

$$i\hbar\partial_t\rho = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi \right] \bar{\Psi} - \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\bar{\Psi} \right] \Psi \quad (\text{II.20})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}(\bar{\Psi}\Delta\Psi - \Psi\Delta\bar{\Psi}) \quad (\text{II.21})$$

$$\rightarrow 0 = \partial_t\rho + \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot (\bar{\Psi} \nabla \Psi - \Psi \nabla \bar{\Psi}) \quad (\text{II.22})$$

Nous pouvons alors définir

$$\mathbf{J} \doteq \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \bar{\Psi} \nabla \Psi - \Psi \nabla \bar{\Psi} \right\} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} [\bar{\Psi} (\nabla \Psi)] \quad (\text{II.23})$$

le courant de probabilité. Nous pouvons alors écrire l'équation de probabilité, ce qui conclut la preuve. ■

---

4. Si  $\Psi_1$  et  $\Psi_2$  sont des solutions de II.12, alors  $\Psi_1 + \Psi_2$  est également une solution de II.12.

L'équation de continuité (II.16) explique que rien ne se perd, rien ne se crée et tout se conserve : en effet, si nous intégrons sur une région A, nous aurons

$$\int_A \frac{\partial \rho}{\partial t} dV + \int_A \nabla \cdot \mathbf{J} dv = \frac{d}{dt} \int_A \rho dV + \int_{\partial A} \mathbf{J} \cdot d\mathbf{s} \quad (\text{II.24})$$

$$\frac{d}{dt} P_A = -F_A \quad (\text{II.25})$$

Où  $P_A$  est la probabilité de trouver une particule dans la région A, et  $F_A$  est le flux de cette particule à travers le bord de la région A. L'équation (II.25) décrit la conservation des particules à travers la surface A.

Nous pouvons également définir les coefficients de **réflexion** et de **transmission** comme suit :

$$R = \frac{J_-[\leftarrow]}{J_-[\rightarrow]}, \quad T = \frac{J_+[\rightarrow]}{J_-[\rightarrow]} \quad (\text{II.26})$$

Où  $J_-[\leftarrow]$  est défini comme étant "le courant de probabilité dans la région négative allant vers la gauche."

Dans le cas d'une onde plane, nous pouvons tautologiquement réécrire (II.13) sous la forme

$$\Psi = C e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} e^{-i\omega t} \quad (\text{II.27})$$

Dès lors,  $\rho = \|\Psi\|^2 = C^2$  est une constante. Nous pouvons utiliser le résultat (II.23) pour voir que, dans le cas d'une **onde plane**,

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{p}}{m} C^2 = \rho \mathbf{v} \quad (\text{II.28})$$

Nous voyons donc bien qu'une onde plane décrit une particule se déplaçant à une vitesse  $\mathbf{v}$ .

### 3.1 Born : étude des collisions. Origine de l'interprétation probabiliste

Que se passe-t-il si une onde plane arrive sur un atome ? Nous allons essayer de trouver une approximation à cette question.

Une fonction d'onde dont l'énergie potentielle  $V(\mathbf{r})$  ne dépend pas du temps doit vérifier l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \partial_t \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V(\mathbf{r}) \Psi \quad (\text{II.29})$$

On parle alors de *potentiel stationnaire*. La solution de cette équation est donnée par

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \phi(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \phi + V(\mathbf{r}) \phi = E \phi \quad (\text{II.30})$$

**Conditions au bord :** pour  $x \rightarrow -\infty$ ,  $\phi = C e^{ikx}$ .

- Une partie de l'onde est construite tout droite.
- Une partie est diffusée.

A grande distance de l'atome, nous avons que

$$\phi(\mathbf{r}) \approx C e^{ikx} + \int d^3k \alpha(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (\text{II.31})$$

$$\text{Avec } \frac{\hbar^2 \|\mathbf{k}\|^2}{2m} = \hbar \omega.$$

La Mécanique Quantique décrit simultanément **toutes** les diffusions possibles. Or, en laboratoire, nous n'observons qu'une seule direction : Max-Born en déduit que la Mécanique Quantique décrit les **possibilités** de diffusions dans les directions  $\mathbf{k}$ .

$$P(\text{diffusion dans la direction } \mathbf{k}) \approx \|\alpha(\mathbf{k})\|^2 \quad (\text{II.32})$$

## 4 Paquet d'onde à une dimension

### 4.1 Vitesse de phase et vitesse de groupe

Une onde est une perturbation se déplaçant dans le milieu. Il est possible de lui associer deux vitesses : soit la *vitesse de phase* (ou *célérité*), et la *vitesse de groupe*. Elle peuvent être différentes, sous certaines conditions.

Revenons au cas particulier d'une particule libre, dont l'état est décrit par le paquet d'onde à une dimension (II.14). Une onde plane (II.27), respectant la relation de dispersion  $w(k)$ , se propage avec la vitesse

$$V_\phi(k) = \frac{\omega}{\text{Re}\{k\}} \quad (\text{II.33})$$

Il s'agit de la **vitesse de phase**. En particulier, prenons l'exemple d'une particule quantique, c'est à dire une particule respectant les équations

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m\hbar} = \hbar \frac{k^2}{2m} \quad (\text{II.34})$$

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad (\text{II.35})$$

Dans cet exemple, la vitesse de phase s'écrit alors

$$V_\phi(k) = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} \quad (\text{II.36})$$

Nous savons que dans le cas d'une onde électromagnétique se propageant dans le vide,  $V_\phi(k)$  est indépendante de  $k$  et se propage à la vitesse de la lumière  $c$ . Notons que toutes les ondes composant un paquet d'ondes se déplacent à la même vitesse, de sorte que le paquet se déplace à la vitesse de la lumière  $c$  dans le vide. **Ce n'est pas le cas dans un milieu dispersif.**

Soit  $A(t, x) = \int dk g(k, \omega) e^{-i\omega(k)t} e^{ikx}$ , où

$$\begin{aligned} g(k, \omega) &: \text{est centré sur } k_0 \text{ de faible largeur } \Delta \\ g(k, \omega) &\approx e^{-\frac{1}{2}(\frac{k-k_0}{\Delta})^2} \end{aligned}$$

Nous voulons nous ramener à une intégrale gaussienne. Notons que

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \partial_k \omega(k - k_0) + \frac{1}{2} \partial_k^2 \omega(k - k_0) \quad (\text{II.37})$$

Le terme  $\partial_k \omega$  représente la **vitesse de groupe**, et  $\partial_k^2 \omega$  représente la **dispersion**.

Nous avons dès lors que

$$A(t, x) \approx e^{-i\omega(k_0)t} e^{ik_0 x} \int dk g(k - k_0) e^{[\omega'(k_0)t + x]} \quad (\text{II.38})$$

Nous y négligeons les effets de  $\partial_k^2 \omega$  car  $\Delta$  est très petit.

Il s'ensuit que le centre du paquet d'onde se déplace à la vitesse

$$v_g = \text{Vitesse de groupe} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \omega' \quad (\text{II.39})$$

Pour une particule quantique, nous avons alors que  $\frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v_{\text{Classique}}$ .

**Note.** Rappelons que la solution à l'intégrale ci-contre, dans le cas où  $\text{si } -\frac{\pi}{4} < \arg \alpha < +\frac{\pi}{4}$  :

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2(\xi+\beta)^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \quad (\text{II.40})$$

### Paquet d'onde Gaussien en dim 1

Nous considérons un modèle à une dimension, avec une particule libre<sup>5</sup>, dont la fonction d'onde à l'instant  $t = 0$  s'écrit

$$\Psi(x, t = 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{ikx} dk \quad (\text{II.41})$$

Ce paquet d'onde est obtenu par superposition d'ondes planes  $e^{ikx}$  avec des coefficients

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} g(k, t = 0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \quad (\text{II.42})$$

---

5. Le potentiel  $V(x) = 0$

qui correspondent à une fonction de Gauss, centrée en  $k = k_0$ . C'est pourquoi nous appelons (II.41) onde gaussienne.

En exploitant le résultat (II.40), nous pouvons alors montrer que II.41 vaut

$$\left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{\frac{1}{4}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{a^2}} \quad (\text{II.43})$$

Nous pouvons en déduire la valeur de la densité de probabilité de la fonction d'onde d'une particule libre à l'instant  $t = 0$  :

$$\|\Psi(x, t = 0)\|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi a^2}} e^{-2\frac{x^2}{a^2}} \quad (\text{II.44})$$

Nous pouvons vérifier que  $\int dx \|\Psi\|^2$  est bien égale à 1.

Nous remarquons alors que  $\Delta x \approx \frac{a}{2}$ . Ainsi,  $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ . Nous en déduisons en particulier que  $\Delta p = \frac{\hbar}{2}$ , et donc que la distribution des vitesses est donnée par  $\Delta v = \frac{\Delta p}{m} = \frac{\hbar}{ma}$  : nous avons un **étalement**.

## 5 Potentiel stationnaire

Nous nous intéressons ici au comportement d'une onde plongée dans un potentiel indépendant du temps ;  $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$ . Cela signifie que les effets quantique doivent se produire lorsque le potentiel varie sur des distances plus courtes que la longueur d'onde : celles-ci ne peuvent alors pas être négligées. Nous allons donc étudier le comportement d'une particule placée dans différents "potentiels carrés", c'est à dire des potentiels dont les variations se font par "marche d'escaliers". Avant de passer à l'étude du potentiel, discutons des propriétés que satisfait l'équation de Schrödinger pour un potentiel indépendant du temps  $V(\mathbf{r})$ .

### 5.1 Equation de Schrödinger indépendante du temps

Recherchons les solutions de l'équation de Schrödinger (II.12). Pour ce faire, passons par une séparation des variables. Plus précisément, posons

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\kappa(t) \quad (\text{II.45})$$

Il suffit alors de placer cette dernière équations dans (II.12) :

$$i\hbar\varphi(\mathbf{r})\partial_t\kappa(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\kappa(t)\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\kappa(t)\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{II.46})$$

$$\frac{i\hbar}{\kappa(t)}\partial_t\kappa(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \quad (\text{II.47})$$

Cette équation indique l'égalité entre une fonction de  $t$  (membre de gauche) et une fonction de  $\mathbf{r}$  (membre de droite). Cette dernière n'est possible que si ils sont en fait tous les deux égales à une constante, que nous poserons (par convention) égale à  $\hbar\omega$ .

Dans le membre de gauche, nous obtenons une équation différentielle non-linéaire du premier ordre. Elle se résoud trivialement en

$$\kappa(t) = c_1 e^{-i\omega t} \quad \forall c_1 \in \mathbb{R} \quad (\text{II.48})$$

En développant l'égalité de droite, nous trouvons alors **l'équation de Schrödinger indépendante du temps** :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = \hbar\omega\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{II.49})$$

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{II.50})$$

$$H\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}) \quad (\text{II.51})$$

En posant  $c_1 = 1$  dans (II.48), nous obtenons alors la fonction

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})e^{-i\omega t} \quad (\text{II.52})$$

qui est solution de l'équation de Schrödinger, si  $\varphi(\mathbf{r})$  est solution de (II.49). On dit que l'on a séparé les variables de **temps** et d'**espace**.

**Note.** Dans (II.50),  $H$  est un opérateur différentiel *linéaire*. Effectivement, si  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont des constantes, alors

$$H[\lambda_1\varphi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\varphi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1 H\varphi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 H\varphi_2(\mathbf{r}) \quad \forall \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{R} \quad (\text{II.53})$$

**Note.** L'équation (II.50) est souvent décrite comme "l'équation aux valeurs propres".

### 5.2 Potentiels à une dimension : description quantitative

Rappelons l'équation de Schrödinger, elle nous sera utile pour la suite :

$$i\hbar\partial_t\Psi(t, \mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\Psi(t, \mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(t, \mathbf{r})$$

Où  $V(\mathbf{r})$  est constante par morceaux.

Nous allons considérer les problèmes de *puit de potentiel*, et de *barrière de potentiel*. Une question légitime est de se demander les raisons derrière cette étude : la réponse est simple. Ils s'agissent de cas théoriques possédant des solutions analytiques, et permettant d'illustrer des effets quantiques importants : l'**effet tunnel**, ainsi que les **états liés**. De plus, certaines situations physiques réelles y sont très proches : pensons notamment à la barrière de Josephson (supraconducteurs), et aux points quantiques : elles consistent dès lors en une excellente approximation de ces phénomènes.

### 5.2.1 Puit de potentiel infini à une dimension

Cette situation correspond à un potentiel prenant les valeurs suivantes, en fonction de sa position <sup>6</sup> :

$$V(x) = \begin{cases} -\infty \\ 0 \\ +\infty \end{cases} \quad (\text{II.54})$$

respectivement en  $x < 0$ ,  $x \in [0, L]$  et  $x > L$ . Appliquons ce potentiel à l'équation de Schrödinger.

**Séparation des variables :**  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \kappa(t)\varphi(\mathbf{r})$ . Nous avons un potentiel stationnaire : reprenons le calcul à partir de (II.50).

La solution temporelle provient de (II.47), et donne

$$\kappa(t) = \kappa_0 e^{-i\omega t} \quad (\text{II.55})$$

Il nous reste à déterminer la solution spatiale. Rappelons les conditions aux bords :  $\varphi(L) = 0 = \varphi(0)$ . Dès lors, nous avons que :

Pour  $0 < x < L$  :  $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\varphi = E\varphi$ . Il s'agit d'une équation différentielle linéaire du second ordre. Sa solution *générale* est de la forme

$$\varphi(\mathbf{r}) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx) \quad \forall c_1, c_2 \in \mathbb{C} \quad (\text{II.56})$$

Afin de respecter les conditions aux bords, nous aurons que

$$c_2 = 0 \quad kL = n\pi \quad (\text{II.57})$$

Dès lors,

$$k_n = \frac{n\pi}{L} \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2 n^2}{L^2} \quad (\text{II.58})$$

Nous avons alors la solution mathématique à notre problème :

$$\Psi_n(\mathbf{r}, t) = \kappa_0 e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (\text{II.59})$$

**Note.** Notons que cette équation implique une **quantification de l'énergie**. La solution physique sera la superposition de tous les états possible :z

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \kappa_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (\text{II.60})$$

### 5.2.2 Puit de potentiel fini à une dimension

Etudions un cas similaire. Soit  $I = [-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}]$ . Dans cette situation, nous avons que

$$\begin{cases} V(x > \|\frac{a}{2}\|) = 0 \\ V(x) = -V_0 \end{cases} \quad (\text{II.61})$$

La résolution de l'équation aux valeurs propres (II.50) s'effectue dans chaque zone <sup>7</sup> indépendamment, et donnera

$$\begin{cases} \varphi(x < -\frac{a}{2}) = A_1 e^{\rho x} + A'_1 e^{-\rho x} & \rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ \varphi(x \in I) = B_2 e^{ikx} + B'_2 e^{-ikx} & k = \sqrt{\frac{2m(V_0 + E)}{\hbar^2}} \\ \varphi(x > \frac{a}{2}) = A_3 e^{\rho x} + A'_3 e^{-\rho x} \end{cases} \quad (\text{II.62})$$

6. Insistons sur le fait que le potentiel est considéré invariant par le temps : nous avons bien un potentiel stationnaire du type  $V(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r})$ .

7. Nous notons I la zone tq  $x < -\frac{a}{2}$ , III la région tq  $x > \frac{a}{2}$  et II la région entre les deux.

**Conditions aux bords.** Rappelons que  $\varphi(x)$  est bornée en les régions I et III. Nous pouvons alors réécrire les équations sous la forme

$$\begin{cases} \varphi(x) = A_1 e^{\rho x} \\ \varphi(x \in I) = B_2 e^{ikx} + B'_2 e^{-ikx} \\ \varphi(x) = A'_3 e^{-\rho x} \end{cases} \quad (\text{II.63})$$

**QUESTION.** Comment avons-nous choisi le terme en  $A'_1$  et  $A_3$  pour la simplification ?

**Conditions de continuité :**  $\varphi(x)$  et  $\partial_x \varphi(x)$  doivent être continue. Dès lors,

— **En  $x = -\frac{a}{2}$ ,** nous avons que :

$$\begin{cases} A_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} = B_2 e^{-\frac{ika}{2}} + B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \\ \rho A_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} = ik \left[ B_2 e^{-\frac{ika}{2}} - B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \right] \end{cases} \quad (\text{II.64})$$

— **En  $x = \frac{a}{2}$ ,** nous avons que :

$$\begin{cases} A'_3 e^{-\frac{\rho a}{2}} = B_2 e^{-\frac{ika}{2}} + B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \\ \rho A'_3 e^{-\frac{\rho a}{2}} = ik \left[ B_2 e^{-\frac{ika}{2}} - B'_2 e^{\frac{ika}{2}} \right] \end{cases} \quad (\text{II.65})$$

**Note.** Nous possédons 4 équations linéaires à 4 inconnues : la solution est non triviale si  $\det [\text{Matrice associée}] = 0$ .

**Note.** Les inconnues dans nos équations sont bien  $A_2, A'_2, B_3$  et  $B'_3$ .

En multipliant la première équation de (II.64) par  $ik$ , et en additionnant/soustrayant les deux équations, nous pouvons obtenir

$$\begin{cases} B_2 = \frac{\rho+ik}{2ik} e^{(ik-\rho)\frac{a}{2}} A_1 \\ B'_2 = -\frac{\rho-ik}{2ik} e^{-\frac{a}{2}[\rho+ik]} A_1 \end{cases} \quad (\text{II.66})$$

Similairement, (II.65) permet de mettre en évidence les relations

$$\begin{cases} B_2 = -\frac{\rho-ik}{2ik} e^{-\frac{a}{2}(\rho+ik)} A'_3 \\ B'_2 = \frac{\rho+ik}{2ik} e^{\frac{a}{2}(ik-\rho)} A'_3 \end{cases} \quad (\text{II.67})$$

Ces deux dernières équations, ensembles, impliquent :

(...)

Les états d'énergie les plus sont alors

$$\approx k = \frac{n\pi}{a} \quad E \approx \frac{\pi^2 \hbar n^2}{2ma^2} - V_0 \quad (\text{II.68})$$

### 5.2.3 Potentiel en escalier

Plaçons-nous dans une région telle que le potentiel est stationnaire, c'est à dire dont la variable spatiale  $\varphi(\mathbf{r})$  de la solution de l'équation de Schrödinger  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  respecte l'équation (II.49). Nous pouvons réécrire cette dernière équation sous la forme

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

Nous pouvons distinguer plusieurs cas.

—  $E > V$ . En introduisant le terme positif  $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \geq 0$ , nous pouvons montrer que les solutions de (II.49) sont de la forme

$$\varphi = A e^{ikx} + A' e^{-ikx} \quad (\text{II.69})$$

Nous parlons d'ondes progressives.

—  $E < V$ . Cette condition correspond aux régions classiquement interdites : il s'agit de l'**effet tunnel**. Dans ce cas, nous introduisons la constante  $\rho$  définie par  $\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \geq 0$ . Nous obtenons alors que la solution est

$$\varphi = B e^{\rho x} + B' e^{-\rho x} \quad (\text{II.70})$$

—  $\mathbf{E} = \mathbf{V}$ . Dans ce cas,  $\varphi(\mathbf{r})$  est une fonction linéaire de  $x$ .

— **Là où  $\mathbf{V}$  est discontinue.** Dans ce cas,  $\varphi$  est continue et  $\partial_x \varphi$  l'est également.

## 6 Approximation semi-classique

L'approximation semi-classique permet d'obtenir une solution de l'Equation de Schrödinger lorsque  $\hbar$  tend vers 0 ; c'est à dire lorsque la longueur d'onde est beaucoup plus ptite que les autres dimensions considérées. Son idée est simple : l'équation de Schrödinger se dérive de l'équation de propagation des ondes. On doit alors retrouver la mécanique classique dans la limite  $\hbar$  tend vers 0, tout comme nous retrouvons l'optique géométrique lorsque  $\lambda$  tend vers 0 dans l'optique ondulatoire.

Notons  $\varphi$  solution stationnaire de l'équation de Schrödinger pour une particule de masse  $m$  dans un potentiel  $V(R)$ . Alors,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 + V(R) \right] \Psi(r) = E \Psi(r)$$

Se réécrit, en posant

$$\Psi(r) = A(r) e^{i \frac{S(r)}{\hbar}} \quad \forall A, S \in \mathbb{R} \quad (\text{II.71})$$

Nous pouvons alors montrer que les relations

$$2A'S' + AS'' = 0 \quad (\text{II.72a})$$

$$\frac{S'^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{A''}{A} + V = E \quad (\text{II.72b})$$

sont équivalentes à l'équation de Schrödinger (II.49). En particulier, (II.72a) peut se résoudre directement et donne

$$A(x) = \frac{A_0}{\sqrt{S'(r)}} \quad \forall A_0 \in \mathbb{R} \quad (\text{II.73})$$

Nous pouvons vérifier que (II.73) est équivalente à l'équation de continuité (II.16)

$$\partial_t \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \mathbf{J} = 0$$

pour une solution stationnaire : effectivement, nous avons que  $\rho(x, t) = |\psi|^2$  ne dépend pas du temps.

Pour résoudre (II.72b), nous faisons l'hypothèse  $\frac{\hbar^2}{2m} \frac{A''}{A}$  est négligeable par rapport aux autres termes. Nous obtenons alors l'équation

$$\frac{S'^2(r)}{2m} + V(r) = E$$

Il s'agit d'une équation bien connue de la mécanique classique : l'équation de **Hamilton-Jacobi**. Ses solutions sont de la forme

$$S'(x) = \pm \rho(r) \quad \rho(r) = \sqrt{2m(E - V(r))} \quad (\text{II.74a})$$

$$S(x) = \pm \int^x dx' \rho(x') \quad (\text{II.74b})$$

Nous avons alors que

$$\Psi(r) = \frac{A_0}{\sqrt{\rho(r)}} e^{\pm i \int^x dx' \frac{\rho(x')}{\hbar}} \quad (\text{II.75})$$

Nous pouvons en déduire que

1. Le nombre d'onde à la position  $x$  est donnée par  $\mathbf{k}(x) = \frac{p(x)}{\hbar}$ .
2. La longueur d'onde à la position  $x$  est donnée par  $\lambda(x) = \frac{2\pi\hbar}{p(x)}$ .
3. La vitesse de groupe est donnée par

$$\frac{1}{V_g} = \frac{\partial k(r)}{\partial \omega} = \frac{\partial p(r)}{\partial E} = \frac{m}{p(r)} = \frac{1}{V_{classique}(r)}. \quad (\text{II.76})$$

La vitesse d'un paquet d'onde sera donnée, selon l'approximation semi-classique, par la vitesse  $V_{classique}(r)$  de la mécanique classique.



4. Dans une région classiquement interdite,

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\rho(r)}} e^{\pm \int^x dx' \frac{\rho(x')}{\hbar}} \quad \text{Avec } \frac{\rho^2(x)}{2m} = V(x) - E \quad (\text{II.77})$$

[Graphique]

Nous pouvons montrer que si la solution décroît exponentiellement à grande distance (proche du point de rebroussement) :

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_b^x k(x') dx' - \frac{\pi}{4}\right) \quad \forall x > b \quad (\text{II.78})$$

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \cos\left(\int_x^a k(x') dx' + \frac{\pi}{4}\right) \quad \forall x < a \quad (\text{II.79})$$

Nous obtenons la condition de quantification semi-classique :

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx \sqrt{2m(E - V(x))} = (n + \frac{1}{2})\pi \quad (\text{II.80})$$

(Valable uniquement pour E grand).

## 6.1 Application à la désintégration alpha des noyaux

La particule alpha a une énergie E. Pour  $R > R_\alpha$ , nous avons une énergie  $V(R) < E$  et sommes alors dans une région classiquement permise. Malheureusement, la particule va devoir traverser une région classiquement interdite - entre  $R$  et  $R_\alpha$ . La probabilité d'émission par unité de temps est approximée par  $\frac{1}{T_{\frac{1}{2}}} \sim \frac{1}{e^{2\gamma}}$ , où :

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_R^{R_\gamma} dr \sqrt{2m_\alpha(V(r) - E)} \quad \text{Avec } V(r) = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ et } E = \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0 R_\alpha} \quad (\text{II.81})$$

$$= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0}} \int_R^{R_\alpha} \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{1}{R_\alpha}} dr \quad (\text{II.82})$$

$$\gamma \approx \frac{\pi}{2\hbar} \sqrt{2m_\alpha} \left[ \frac{z_\alpha z e^2}{4\pi\epsilon_0} \right] \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (\text{II.83})$$

$$\rightarrow \log T_{\frac{1}{2}} = a \frac{z}{\sqrt{E}} + b \quad (\text{II.84})$$

Cette loi est bien vérifiée expérimentalement. Elle explique pourquoi il n'y a pas de désintégration des noyaux les plus lourds.

## Troisième partie

# Notions mathématiques

## 7 Série de Fourier

Une série de Fourier est une série de la forme

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} dx f(x) e^{-2\pi i (\frac{n}{T})x} \quad (\text{III.1a})$$

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{2\pi i (\frac{n}{T})x} \quad (\text{III.1b})$$

## 8 Transformées de Fourier

$$\hat{f}(k) = F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{III.2a})$$

$$f(x) = F^{-1}(\hat{f}) = \int dk \hat{f}(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{III.2b})$$

**Remarque 8.1.** Si  $f$  est à support borné et  $\{-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}\}$  contraint le support, alors  $C_n = \frac{\sqrt{2\pi}}{T} \hat{f}(\frac{2\pi n}{T})$ .

$$\rightarrow f(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\sqrt{2\pi}}{T} \hat{f}(\frac{2\pi n}{T}) e^{i \frac{2\pi n}{T} x} \quad (\text{III.3})$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \hat{f}(k_n) \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{2\pi}} \Delta k \quad k_n = \frac{2\pi n}{T} \text{ et } \Delta k = \frac{2\pi}{T} \quad (\text{III.4})$$

$$\approx \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hat{f}(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (\text{III.5})$$

**Remarque 8.2.** Ces fonctions suivent certaines propriétés intéressantes. Soit  $h(x)$  et  $\hat{h}(x)$  deux fonctions reliées par une transformations de Fourier. Dès lors,

- Si  $h(x)$  est linéaire, alors  $\hat{h}(x)$  l'est également :  $h(x) = af(x) + bg(x)$ , alors  $\hat{h}(k) = a\hat{f}(k) + b\hat{g}(k)$ .
- Si  $h(x) = f(x - x_0)$ , alors  $\hat{h}(k) = e^{-ikx_0} \hat{f}(k)$ . Il s'agit d'une translation. Inversement, la propriété de modulation s'écrit  $h(x) = f(x) e^{ik_0 x}$ , alors  $\hat{h}(k) = \hat{f}(k - k_0)$ .
- Si  $h(x) = f(ax)$ , le changement d'échelle implique que  $\hat{h}(k) = \frac{1}{a} \hat{f}(\frac{k}{a})$ .
- La relation de conjugaison sous une transformation de Fourier est que  $h(x) = \bar{f}(x)$  implique  $\hat{h}(k) = \hat{f}(-k)$ . Notons que si  $f(x)$  est réel, alors  $\hat{f}(k) = -\hat{f}(k)$ .
- $\hat{f}(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x)$ .
- La dérivée de  $\hat{f}(k)$  est  $ik\hat{f}(k)$ . Cela se généralise à  $\hat{f}^{(n)}(k) = (ik)^n \hat{f}(k)$ . En particulier, si  $f(x)x^n$  est intégrable, alors  $\hat{f}(k)$  est  $n$ -fois dérivable. Inversement, si  $f(x)$  est  $n$ -fois intégrable, alors  $\hat{f}(k)k^n$  est intégrable.
- La propriété de convolution établit que si  $h(x) = (f \circ g)(x) = \int dy f(y)g(x-y)$ , alors  $\hat{h}(k) = \hat{f}(k) \times \hat{g}(k)$ .

**Théorème 8.1** (Plancherel). Soit  $f(x)$  une fonction, et  $\hat{f}(k)$  sa transformée de Fourier. Nous avons alors l'équivalence des intégrales :

$$\int dx f(x) \bar{g}(x) = \int dk \hat{f}(k) \bar{\hat{g}}(k) \quad (\text{III.6})$$

**Théorème 8.2** (Égalité de Parseval). Soit  $f(x)$  une fonction, et  $\hat{f}(k)$  sa transformée de Fourier. Alors,

$$\int dx \|f(x)\|^2 = \int dk \|\hat{f}(k)\|^2 \quad (\text{III.7})$$

## 9 Distribution

### 9.1 Espace de fonctions test

Soient  $D$ , l'ensemble des fonctions  $C^\infty$  à support compact (distribution  $D$ ), et  $S$  - l'ensemble des fonctions  $C^\infty$  à décroissance rapide (distribution tempérée  $S$ ). Imposons une notion de continuité/topologie sur les fonctions test :

$$\varphi_k = \varphi \text{ si et seulement si } (\partial_x^{(\alpha)} \varphi_k) = (\partial_x^{(\alpha)} \varphi) \quad (\text{III.8})$$

uniformément pour tout  $\alpha$ .

Soit  $T$  des formes linéaires continues sur l'espace des fonctions tests.

**Proposition 9.1.** *Soit  $T : D \rightarrow \mathbb{R} : \varphi \rightarrow T \cdot \varphi$ . Si  $\varphi_k = \varphi$ , alors  $T \cdot \varphi_k \rightarrow T \cdot \varphi$  généralise la notion de fonction.*

### 9.2 Opérations sur les distributions

**Proposition 9.2** (Dérivée d'une distribution).  $T' \cdot \varphi = T \cdot (-\varphi')$

**Proposition 9.3** (Multiplication d'une distribution par une fonction test).  $\Phi T \cdot \varphi = T \cdot \varphi \Phi$  **Nous ne pouvons pas multiplier des distributions entre-elles.**

**Théorème 9.1** (Théorème de structure). *Localement, une distribution est égale à la dérivée  $\alpha^{eme}$  d'une fonction continue. Elle est dite tempérée lorsqu'elle est égale à la dérivée  $\alpha^{eme}$  d'une fonction continue à croissance lente<sup>8</sup>.*

### 9.3 Distributions tempérées

A partir de maintenant, nous noterons  $F$  une transformée de Fourier, et  $\mathbb{S}$  une invariance sous  $F$ .

**Définition 9.1.** *Soit  $T \in \mathbb{S}$ . Alors,  $FT$  existe et est défini par  $FT \cdot \Phi = T \cdot F\Phi$ .*

Si  $f$  est une fonction, alors :

$$FT_f \cdot \Phi = T_f \cdot F\Phi \quad \text{Où} \quad \int dx \left( \int dx \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} f(x) \right) \Phi(k) \text{ et } \int dx f(x) \left( \int dk \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \Phi(k) \right) \quad (\text{III.9})$$

### 9.4 $\delta$ de Dirac

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty & \text{en } x = 0 \\ 0 & \text{en } x \neq 0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) = 1 \quad (\text{III.10})$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha \rightarrow 0} f_\alpha(x) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx f_\alpha(x) = 1 \quad (\text{III.11})$$

Où  $f_\alpha(x)$  est strictement positif.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \delta(x) = f(0) \quad (\text{III.12})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(\Gamma - x) \delta(x - \zeta) = \delta(\Gamma - \zeta) \quad (\text{III.13})$$

$$\delta'(x) : \int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) f(x) = [\delta(x) f(x)]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \delta(x) f'(x) \quad (\text{III.14})$$

$$= -f'(0) \quad (\text{III.15})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \delta(x') = \theta(x) \quad \int dx f(x) \delta(x - a) = f(a) \quad (\text{III.16})$$

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{\|\alpha\|} \delta(x) \quad \delta(g(x)) = \frac{1}{\|g'(x_0)\|} \delta(x - x_0) \delta(-x) = \delta(x) \quad (\text{III.17})$$

$$(\text{III.18})$$

---

8. ne croissant pas plus vite qu'un polynome.

## 9.5 Transformée de Fourier d'une fonction périodique

Si  $x(t)$  est une fonction de période  $T$  tel que  $x(t + T) = x(t)$ . Alors  $x(t)$  peut-être représenté comme une série de Fourier.

$$x(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k e^{2\pi i k \frac{t}{T}} \quad (\text{III.19})$$

Prenons la transformée de Fourier de (III.19).

$$\hat{x}(\omega) = \int dt \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} x(t) = \int_{k=-\infty}^{+\infty} c_k \int dt \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} e^{2\pi i k \frac{t}{T}} \quad (\text{III.20})$$

$$= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \frac{c_k}{2\pi} \delta\left(\omega - \frac{2\pi k}{T}\right) \quad (\text{III.21})$$

Nous appelons  $\hat{x}(\omega)$  est la somme des deltas espacés de  $\frac{2\pi}{T}$ .

## Quatrième partie

# Formalisme de Dirac

### 10 Expérience de Stern-Gerlach

L'expérience consiste à faire passer des atomes d'argent dans un champ magnétique non uniforme. Classiquement, les atomes d'argent, ayant un moment cinétique et un moment magnétique orbital également nul, ne devraient pas subir l'influence du champ magnétique. L'expérience montre que le faisceau se **sépare en deux**. Nous expliquons ce résultat en introduisant le moment cinétique de spin.

Mathématiquement, rappelons à toute fin utile que :

$$\text{Moment angulaire } \mathbf{L} = m\mathbf{r} \times \mathbf{v} \quad (\text{IV.1})$$

$$\text{Moment magnétique } \mathbf{m} = I\mathbf{S} = \frac{ev}{2\pi r}\pi r^2 = \frac{1}{2}evr = \frac{1}{2}\frac{e}{m}\mathbf{L} \quad I = \frac{ev}{2\pi r} \quad (\text{IV.2})$$

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2}\frac{e}{m}\mathbf{L} \quad (\text{IV.3})$$

Où  $I$  est le courant et  $S$  est la surface considérée.

En pratique, les atomes/particules élémentaires suivent cette relation à un facteur prêt :  $\mathbf{m} = \frac{g}{2}\frac{e}{m}\mathbf{L}$ , où  $g$  est le **facteur de Landé**. Elle prend différentes valeurs en fonction de ce que nous considérons : nous avons  $g = -2.002$  pour un électron,  $g_n = -3.8$  et  $g_p = 5.6$ .

En pratique, nous mettrons en évidence la quantification du moment angulaire en mesurant le moment magnétique. L'énergie d'un moment magnétique dans un champ magnétique sera donnée par l'expression

$$E = \mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{IV.4})$$

Lorsque le champ est non-uniforme, nous observons un gradient d'énergie :

$$\mathbf{F} = \nabla \cdot (\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) = \nabla \cdot (E) \quad (\text{IV.5})$$

En faisant l'expérience, nous nous attendons donc à observer ce gradient d'énergie - et donc un "gradient de résultats". Ce n'est pas le cas : seul deux tâches sont observées. Chaque électron se comporte comme un aimant à seulement deux directions verticales possibles : Nord-Sud ou Sud-Nord. Cette propriété quantique s'appelle le spin, et s'écrit :

$$S = \pm \frac{\hbar}{2} \quad (\text{IV.6})$$

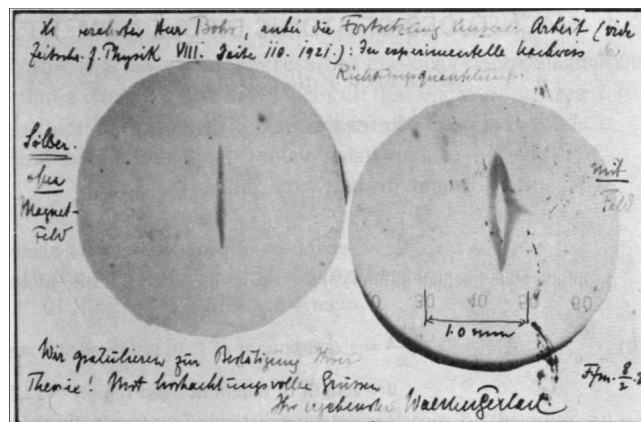


FIGURE 1 – Une photo des rayons séparés, avec un message. La traduction donne : "Ci-contre, une preuve expérimentale du spin quantique. Nous vous félicitons pour la vérification expérimentale de votre théorie".

## 11 Notations propre à la Mécanique Quantique

Dans le cadre de la Mécanique Quantique, nous nous placerons dans des espaces de Hilbert  $\mathbb{H}$  séparables.

Nous introduisons :

- Vecteur  $\in \mathbb{H} : |\Psi\rangle$ . Il s'agit d'un vecteur colonne  $v$ , appelé le ket.
- Vecteur transposé conjugué  $\in \mathbb{H} : \langle\Psi|$ . Il s'agit du vecteur ligne<sup>9</sup>  $\bar{v}^T$ , appelé le bra.
- Le produit scalaire  $\langle\varphi, \Psi\rangle$ , appelé le bracket.

### 11.1 Correspondance entre bra et ket

Si  $|\Psi\rangle = \alpha|\Phi\rangle + \beta|\Phi'\rangle$ , alors  $\langle\Psi| = \bar{\alpha}\langle\Phi| + \bar{\beta}\langle\Phi'|$  : la correspondance bra  $\rightarrow$  ket est donc antilinéaire.

**Remarque 11.1.** Si  $\lambda$  est un nombre complexe et  $|\Psi\rangle$  un ket, alors  $\lambda|\Psi\rangle$  est un ket. Nous l'écrivons parfois  $|\lambda\Psi\rangle$ . Il faudra alors faire attention que la relation entre bra et ket étant anti-linéaire,  $\langle\lambda\Psi| = \bar{\lambda}\langle\Psi|$ .

Notons que les états quantiques sont :

1. *normalisés* :

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 \quad (\text{IV.7})$$

en raison de l'interprétation probabiliste.

2. *définis à une phrase prêt* :

$$|\Psi\rangle \quad e^{i\varphi}|\Psi\rangle \quad (\text{IV.8})$$

représentent le même état quantique.

Nous sommes dans un espace projectif de Hilbert. Dès lors,

$$|\Psi\rangle \sim |\varphi\rangle \quad \text{quand} \quad |\Psi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$$

#### 11.1.1 Exemples

**Spin  $\frac{1}{2}$**  : base orthonormée =  $\left\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\right\}$ .

Nous pouvons définir un état arbitraire :

$$|\Psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}|\downarrow\rangle \quad (\text{IV.9})$$

Où  $\theta \in [0, \pi]$  et  $\varphi \in [0, 2\pi]$  et  $\theta, \varphi$  appartiennent à la sphère de Bloch.

Si  $|\varphi\rangle = \cos\frac{\theta'}{2}|\uparrow\rangle + e^{i\varphi'}\sin\frac{\theta'}{2}|\downarrow\rangle$ , alors le produit scalaire donnera

$$\langle\varphi|\Psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta'}{2} + e^{i\varphi-\varphi'}\sin\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta'}{2} \quad (\text{IV.10})$$

**Oscillateur harmonique** : base orthonormée =  $\left\{|n\rangle : n = 0, 1, 2, \dots\right\}$  et les états d'énergies sont donnés

par  $E_n = \hbar\omega\left\{n + \frac{1}{2}\right\}$ .

Nous pouvons définir un état arbitraire par  $|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$  avec  $\sum_n \|c_n\|^2 = 1$ .

## 12 Opérateurs linéaires

Soit  $A : \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H} : |\Psi\rangle \rightarrow A|\Psi\rangle$  un opérateur linéaire, c'est à dire tel quel  $A(a|\Psi\rangle + b|\varphi\rangle) = a(A|\Psi\rangle) + b(A|\varphi\rangle)$ . Soit  $B$  un (autre) isomorphisme<sup>10</sup> sur le même ensemble  $\mathbb{H}$ . Nous pouvons définir plusieurs opérations :

- **Produit d'opérateurs** :  $(AB)|\Psi\rangle = A(B|\Psi\rangle)$ . B agit d'abord sur ket  $|\psi\rangle$  pour donner  $B|\Psi\rangle$ , et A agira ensuite sur  $A|\Psi\rangle$ .
- En général,  $AB \neq BA$ , le commutateur  $[A, B]$  de A, B est par définition  $[A, B] = AB - BA$ .

9. Nous pouvons également le voir comme un élément du dual  $\mathbb{H}^*$

10. Demander vérification à Massar.

— **Anticommutateur** :  $\{A, B\} = AB + BA$ .

Action de A sur le dual/les bras. Soit  $A : \mathbb{H}^* \rightarrow \mathbb{H}^* : \langle \varphi | \rightarrow \langle \varphi | A$  est défini par  $\{ \langle \varphi | A \} | \Psi \rangle = \langle \varphi | \{ A | \Psi \} \}$ , pour tout  $|\varphi\rangle, |\Psi\rangle$ . Nous le noterons  $\langle \varphi | A | \Psi \rangle$ .

**Remarque 12.1.** Observons que l'ordre dans lequel apparaît les symboles a une importance capital. Seul les nombres complexes peuvent être déplacés sans influencer le résultat.

**Exemple 12.1.** Soit  $|\Psi\rangle$  et  $|\Theta\rangle$  deux kets. Ecrivons les dans l'ordre inverse :  $\langle \Psi |$  et  $\langle \Theta |$ . Considérons

$$|\Psi\rangle \langle \Theta| \quad (\text{IV.11})$$

Prenons un ket  $|\gamma\rangle$  tel que

$$|\Psi\rangle \langle \Theta | \gamma \rangle \quad (\text{IV.12})$$

Nous avons que  $\langle \Theta | \gamma \rangle$  est un nombre complexe ; par conséquent, nous avons que un bra  $\langle \Psi |$  multiplié par un scalaire. Nous avons alors que (IV.11) appliqué à un ket donne un nouveau ket.

## 13 Opérateur adjoint $A^\dagger$

**Définition 13.1.** Soit  $A : \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$  un opérateur linéaire. Nous définissons l'opérateur adjoint  $A^\dagger : \mathbb{H} \rightarrow \mathbb{H}$  par  $\langle \Psi | A^\dagger | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \Psi \rangle^*$  pour tout  $|\Psi\rangle, |\varphi\rangle$ .

Si  $\{|u_i\rangle\}$  forme une base orthonormée, alors :

- $\langle u_i | A | u_j \rangle = a_{ij}$
- $\langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = a_{ij}^*$

$\rightarrow A^\dagger = \overline{A^T}$  est la transposée conjuguée<sup>11</sup>.

### 13.1 Propriétés intéressantes

Nous donnons ici une série de propriétés de l'opérateur adjoint  $A^\dagger$ .

1.  $(A^\dagger)^\dagger = A$
2.  $(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$  pour tout  $\lambda \in \mathbb{C}$ .
3.  $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
4.  $(AB)^\dagger = A^\dagger B^\dagger$ .
5. Si  $A = |\alpha\rangle \langle \beta|$ , alors  $A^\dagger = |\beta\rangle \langle \alpha|$ .

### 13.2 Exemples d'opérateurs

1. Soit  $A = |\alpha\rangle \langle \beta|$ . Alors,

$$\langle \varphi | A | \Psi \rangle = \langle \varphi | \{ |\alpha\rangle \langle \beta| \} | \Psi \rangle \quad (\text{IV.13})$$

$$= \langle \varphi | \alpha \rangle \langle \beta | \Psi \rangle \quad (\text{IV.14})$$

$$\text{Et } A | \Psi \rangle = |\alpha\rangle \langle \beta | \Psi \rangle \quad (\text{IV.15})$$

2. Soit  $\{(u_i)\}$  une base orthonormée. Nous avons que  $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$ . De plus, nous appelons *éléments de la matrice A* l'opérateur

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = a_{ij} \quad (\text{IV.16})$$

Nous pouvons représenter A dans la base via

$$A = \sum_{i,j} a_{ij} |u_i\rangle \langle u_j| \quad (\text{IV.17})$$

---

11. Ask teacher what's up.

## 14 Opérateur Hermitien et observable

**Définition 14.1.** Un opérateur  $A$  est Hermitien (ou encore Hermitique) lorsque  $A = A^\dagger$ .

**Proposition 14.1.** En particulier, nous avons alors que  $\langle u_i | A | u_j \rangle = a_{ij} = \langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = \overline{a_{ji}}$ .

**Définition 14.2.** Un opérateur Hermitien est dit observable lorsqu'il possède une base de vecteurs propres.

### 14.1 Equation aux vecteurs propres

Soit

$$A |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle. \quad (\text{IV.18})$$

**Proposition 14.2.** Lorsque  $A = A^\dagger$  est Hermitien, les valeurs propres sont réelles.

*Démonstration.*  $\lambda = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A^\dagger | \Psi \rangle = \overline{\langle \Psi | A | \Psi \rangle} = \overline{\lambda}$ . ■

**Proposition 14.3.** Lorsqu'un opérateur est Hermitien, alors les vecteurs propres associés à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux.

$$A |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle \quad A |\Phi\rangle = \lambda' |\Phi\rangle \quad (\text{IV.19})$$

*Démonstration.*

$$\begin{aligned} \lambda \langle \Phi | \Psi \rangle &= \langle \Phi | (A |\Psi\rangle) = \langle \Phi | A^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Phi \rangle^* \\ &= \langle \Psi | (\lambda' |\Phi\rangle)^* = \lambda'^* \langle \Psi | \Phi \rangle^* = \lambda' \langle \Phi | \Psi \rangle \end{aligned}$$

Nous avons en général que  $\lambda - \lambda' \neq 0$ . Dès lors, il s'ensuit que  $\langle \Phi | \Psi \rangle = 0$  : la conclusion s'ensuit. ■

**Proposition 14.4.** Pour un opérateur Hermitien  $A$ , nous avons que :

- En dimension finie,  $A$  possède une base orthonormée de vecteurs propres.
- En dimension infinie, cela n'est pas nécessairement le cas.

*Démonstration.* Cette propriété n'est pas démontrée. Pour une preuve détaillée, se référer aux notes 2019-2020 de MATH-F102 (second quadrimestre) par Samuel FIORINI. ■

### 14.2 Exemples d'opérateurs

- **Projecteurs** : Soit un opérateur  $\pi$  tel que :  $\begin{cases} \pi = \pi^\dagger \\ \pi^2 = \pi \end{cases}$ . Les valeurs propres sont alors soit 0, soit 1.

*Démonstration.*

$$\begin{aligned} \pi |\Psi\rangle &= \lambda |\Psi\rangle \\ \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \pi | \Psi \rangle = \langle \Psi | \pi^2 | \Psi \rangle \\ &= \langle (\langle \Psi | \pi) (\pi | \Psi) \rangle \\ &= \lambda \overline{\lambda} \langle \Psi | \Psi \rangle \end{aligned} \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Dès lors, nous avons que  $\lambda^2 = \lambda$  : soit donc  $\lambda = 0$  ou  $\lambda = 1$ . ■

Nous avons alors que  $|\Psi\rangle$  et  $\langle \Psi |$  sont des projecteurs  $\forall |\Psi\rangle$ .

**Remarque 14.1.** Une application linéaire  $\Psi$  tel que  $\Psi^2 = \Psi$  est dite idempotente.

**Définition 14.3.** Si  $\{|u_i\rangle : i \in \mathbb{N}\}$  est une base orthonormée et si  $I$  est un sous-ensemble de  $\mathbb{N}$ , alors  $\pi = \sum_{i \in I} |u_i\rangle \langle u_i|$  est un projecteur.

- **Oscillateur harmonique** : Soit  $\{|n\rangle : n \in \mathbb{N}\}$ . Nous définissons alors plusieurs opérations :
  - Opérateur destruction :  $a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$  et  $a |0\rangle = 0$ . En particulier, les éléments de la matrice de  $a$  sont donnés par  $\langle m | a | n \rangle = \sqrt{n} \delta_m^{n-1}$ .
  - Opérateur création : Soit  $a^\dagger$  l'hermitien conjugué de  $a$ . Nous avons alors que  $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$ .
- **Opérateur identité** : Soit  $\mathbb{I} |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$  pour tout  $|\Psi\rangle$  sur une base orthonormée  $\{|u_i\rangle : i \in \mathbb{N}\}$ . Alors, nous avons que  $\mathbb{I} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i|$ . Il s'agit de la définition de l'opérateur identité.
- **Spin  $\frac{1}{2}$**  : Soit une base orthonormée  $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ .



## Cinquième partie

# Postulats de la Mécanique Quantique

Dans ce chapitre, nous allons énoncer les postulats de la mécanique quantique selon le formalisme développé en IV. Ils permettront de répondre aux questions suivantes :

1. Comment décrire mathématiquement l'état d'un système quantique à un instant donné ?
2. Comment, cet état étant donné, prévoir les résultats de mesure des diverses grandeurs physiques ?
3. Comment trouver l'état du système à un instant  $t$  quelconque lorsqu'on connaît ce état à l'instant  $t_0$  ?

## 15 Énoncé des postulats

### PREMIER POSTULAT - Vecteur d'état $|\Psi\rangle$

A tout système quantique correspond au moins un *espace de Hilbert* complexe et séparable  $\mathbb{H}$  dans lequel la théorie quantique du système peut-être formulée. Tout état accessible du système quantique correspond alors à un *vecteur normé*  $|\Psi\rangle$  dans  $\mathcal{H}$  dont la phase globale est arbitraire.

Ce postulat a plusieurs implications :

- Tout système quantique est placé dans un espace vectoriel : cela implique un *principe de superposition*. De fait, si  $|\Psi_1(t)\rangle$  et  $|\Psi_2(t)\rangle$  sont des vecteurs d'états, alors  $\alpha|\Psi_1(t)\rangle + \beta|\Psi_2(t)\rangle$  est également un vecteur d'état.
- Le produit scalaire  $\langle\Psi|\varphi\rangle$  est sesquilinéaire. Nous pouvons alors effectuer des calculs d'angles et de distances dans  $\mathcal{H}$ .
- Un état du système est bien défini *séparément* des grandeurs observables, celles-ci modifiant son état.

### SECOND POSTULAT - Observables $|\hat{P}\rangle$

A toute grandeur classique correspond un *opérateur hermitien*  $\hat{P}$  agissant dans  $\mathcal{H}$ . Le processus de mesure quantique consiste à relever les propriétés fondamentales de ces opérateurs. En d'autres termes, les résultats de la mesure d'une observable sont les diverses valeurs propres (réelles) de cette observable.

Lorsque l'opérateur  $A$  possède une base de vecteurs propres, nous pouvons écrire  $A$  sous la forme

$$A = \sum_n a_n P_n \quad (\text{V.1})$$

où  $a_n$  est une valeur propre de  $A$  et  $P_n$  est un projecteur sur le sous-espace propre de  $A$  de la valeur propre  $a_n$ .

La probabilité d'observer le résultat  $a_n$  dans l'état  $|\Psi\rangle$  est donnée par  $P(a_n) = \langle\Psi|P_n|\Psi\rangle$  où  $P_n$  est un projecteur.

Nous pouvons vérifier que cela respecte bien les axiomes de la théorie des probabilités :

1. **Normalisation** :  $\sum_n P(a_n) = \sum_n \langle\Psi|P_n|\Psi\rangle = \langle\Psi|\sum_n P_n|\Psi\rangle = \langle\Psi|\mathbb{I}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ .
2. **Positivité** :  $P(a_n) = \langle\Psi|P_n|\Psi\rangle = \langle\Psi|P_n^2|\Psi\rangle = \|P_n|\Psi\rangle\|^2 \geq 0$ .
3. **Probabilité indépendante de la phase**. En effet, lorsque  $|\Psi\rangle \rightarrow e^{i\varphi}|\Psi\rangle$ ,  $P(a_n)$  ne change pas.

### TROISIEME POSTULAT - Interprétation probabiliste

Le résultat d'une mesure sur un opérateur  $\hat{A}$  à un instant donné est aléatoire. Si ce résultat est une valeur propre  $a$ , la probabilité d'obtenir précisément cette valeur propre plutôt qu'une autre dans le spectre de  $\hat{A}$  est donnée par le module carré de la projection de l'état sur l'état propre  $|a\rangle$  associé à la valeur propre mesurée.

- $P_a = \|\langle a|\Psi\rangle\|^2$  dans le cas discret, et  $dP(a) = \|\Psi(a)\|^2 da$  dans le cas continu.
- Nous ne sommes en mesure que d'effectuer des prédictions probabilistes. Il faut dès lors effectuer un grand nombre d'expériences. Nous n'avons accès qu'aux *valeurs moyennes* de  $\hat{A}$ , et les écart-types associés.
- Le Théorème d'Heisenberg  $\Delta A \Delta B \geq \frac{\|[\hat{A}, \hat{B}]\|}{2}$  implique que deux observables qui ne commutent pas ne peuvent pas être observées en même temps.
- *Règle de Born* : La probabilité de transition entre  $|\Psi\rangle$  et  $|\varphi\rangle$  est donnée par  $\|\langle\varphi|\Psi\rangle\|^2$ .

### 15.1 Valeur moyenne d'une observable $\mathcal{A}$

La moyenne d'une observable physique  $\mathbb{A}$  est donnée par  $\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) = \sum_n a_n \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_n a_n P_n | \Psi \rangle$ , ce qui implique que  $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ .

### 15.2 Ecart quadratique moyen

**Lemme 15.1.**  $A^2 = \sum_n a_n^2 P_n$

*Démonstration.*

$$A^2 = \left( \sum_n a_n P_n \right) \left( \sum_{n'} a_{n'} P_{n'} \right) = \sum_{nn'} a_n a_{n'} P_n P_{n'} = \sum_n a_n^2 P_n.$$

Effectivement, remarquons que  $P_n P_{n'}$  revient à  $\delta_{nn'} P'_n$ . ■

$$\begin{aligned} \Delta A^2 &= \sum_n a_n^2 P(a_n) - \langle A \rangle^2 \\ &= \sum_n a_n^2 \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \sum_n a_n^2 \langle \Psi | P_n | \Psi \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | \sum_n a_n^2 P_n | \Psi \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \langle \Psi | A^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | A | \Psi \rangle^2. \end{aligned}$$

**Remarque 15.1.** Nous ne pouvons pas mesurer simultanément des observables qui ne commutent pas.  $A$  l'inverse, nous **pouvons** mesurer simultanément des observables qui commutent :  $[A, B] = 0$ .

#### QUATRIEME POSTULAT - Postulat de la mesure

Si la mesure de l'observable  $\hat{A}$  sur le système dans l'état  $|\Psi\rangle$  fournit une valeur propre  $\lambda$  (associée au vecteur propre  $|\lambda\rangle$ ), l'état du système immédiatement après la mesure est *projeté* sur le sous-espace propre associé à  $\lambda$ .

- La mesure de  $|\Psi\rangle \rightarrow \hat{P}|\Psi\rangle \propto |\lambda\rangle$  s'effectue au moyen d'un projecteur orthogonal  $\hat{P}^2 = \hat{P}$ ,  $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ .
- C'est un processus *irréversible* qui ne conserve pas la probabilité. Après une mesure, on parle de "perte de la cohérence quantique".
- Aux échelles microscopiques, toute mesure perturbe fortement le système (exemple : Effet Compton).

### 15.3 Evolution des systèmes dans le temps

#### CINQUIEME POSTULAT - Évolution des États

A tout système peut-être associé un opérateur hermitien  $\hat{H}$  appelé Hamiltonien et représentant l'énergie totale du système. Cet opérateur régit l'évolution temporelle du vecteur d'état  $|\Psi(t, \mathbf{x})\rangle$  au moyen de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t, \mathbf{x})\rangle = \hat{H} |\Psi(t, \mathbf{x})\rangle$$

- L'évolution est *unitaire*, c'est à dire  $|\Psi(t, \mathbf{x})\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\Psi(t_0, \mathbf{x})\rangle$  par conservation de la probabilité.
- Un état stationnaire est un état propre de l'hamiltonien.

Soit une base  $\{|u_i\rangle\}$  orthonormée. Alors,

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |u_i\rangle \tag{V.2}$$

$$H(t) = \sum_{ii'} |u_i\rangle \langle u_{i'} | H_{ii'}(t) \tag{V.3}$$

**Proposition 15.1.** Soit  $|\Psi(t)\rangle$  une solution de l'équation de Schrödinger (II.12). Alors, le produit scalaire  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle$  est constante.

Démonstration.

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \left( \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \left( \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \right) \quad (\text{V.4})$$

Remarquons que  $H$  est un opérateur hamiltonien. Dès lors,

$$\langle \Psi(t) | H = -i \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \quad H^\dagger = H. \quad (\text{V.5})$$

Dès lors,

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = i \langle \Psi(t) | H(t) | \Psi(t) \rangle - i \langle \Psi(t) | H(t) | \Psi(t) \rangle = 0. \quad (\text{V.6})$$

■

**Remarque 15.2.** Nous prenons  $\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1$ .

## 15.4 Réduction du paquet d'onde

Supposons que nous souhaitions mesurer, en un instant  $t$  donné, une grandeur physique  $\mathcal{A}$ . Si nous connaissons  $|\Psi\rangle$ , nous pouvons<sup>12</sup> obtenir les probabilités des différents résultats possibles. Cependant, en effectuant l'expérience, nous n'obtiendrons qu'un seul des résultats possibles : ce faisant après avoir obtenu le résultat  $a_n$ <sup>13</sup>, on postule que l'état du système change :  $|\Psi\rangle \rightarrow |u_n\rangle$ .

### SIXIEME POSTULAT - Réduction du paquet d'onde

Si la mesure de la grandeur physique  $A$ , à l'instant  $t$ , sur un système représenté par le vecteur  $|\Psi\rangle$  donne comme résultat la valeur propre  $a_n$ , alors l'état du système immédiatement après la mesure est projeté sur le sous-espace propre associé à  $a_n$ .

$$|\Psi'\rangle = \frac{\hat{P}_n |\Psi\rangle}{\sqrt{P(a_n)}}$$

Où  $P(a_n)$  est la probabilité de trouver comme résultat la valeur propre  $a_n$ , et  $\hat{P}_n$  est l'opérateur projecteur défini par  $\hat{P}_n = \sum_{k=1}^{g_n} |u_{n,k}\rangle \langle u_{n,k}|$ , où  $g_n$  est le degré de dégénérescence de la valeur propre  $a_n$  et les  $|u_{n,k}\rangle$  sont les vecteurs de son sous-espace propre.

## 15.5 Hamiltonien indépendant du temps

Lorsque l'Hamiltonien ne dépend pas du temps, nous parlons de système *conservatif*. Rappelons l'équation aux valeurs propres (II.51) :

$$H |\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n |\varphi_{n,\tau}\rangle$$

Où les  $|\varphi_{n,\tau}\rangle$  forment une base de vecteurs propres ( $H$  est une observable). En particulier, notons que  $H$  étant hermitique, cette dernière égalité peut se réécrire :

$$\langle \varphi_{n,\tau} | H = E_n \langle \varphi_{n,\tau} | \quad (\text{V.7})$$

Nous allons montrer que  $E_n$  et  $|\varphi_{n,\tau}\rangle$  suffisent à déterminer les solutions de l'équation de Schrödinger.

Notons que  $|\varphi_{n,\tau}\rangle$  formant une base, nous pouvons pour chaque valeur de  $t$  développer un état du système  $|\Psi\rangle$  dans la base :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t) |\varphi_{n,\tau}\rangle \quad (\text{V.8})$$

Où  $c_{n,\tau}(t) = \langle \varphi_{n,\tau} | \Psi(t) \rangle$ . Projetons alors l'équation de Schrödinger sur chacun des états  $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ . Nous obtenons que :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \varphi_{n,\tau} | \Psi(t) \rangle &= \langle \varphi_{n,\tau} | H | \Psi(t) \rangle \\ i\hbar \partial_t c_{n,\tau}(t) &= E_n \langle \varphi_{n,\tau} | \Psi(t) \rangle = E_n c_{n,\tau} \end{aligned}$$

12. à travers des techniques qui seront expliquées ultérieurement.

13. on parle de la valeur propre  $a_n$ .

Nous obtenons alors l'équation différentielle d'ordre 1 en  $c_{n,\tau}(t)$

$$i\hbar\partial_t c_{n,\tau}(t) = E_n c_{n,\tau}. \quad (\text{V.9})$$

Sa solution générale est donné par

$$c_{n,\tau}(t) = c_{n,\tau}(t_0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)} \quad (\text{V.10})$$

Dès lors, le vecteur d'état  $|\Psi(t)\rangle$  vaudra

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)} |\varphi_{n,\tau}\rangle \quad (\text{V.11})$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger avec un Hamiltonien indépendant du temps, il suffit de diagonaliser l'Hamiltonien et de connaître la décomposition de  $|\Psi\rangle$  à l'instant initial dans la base des vecteurs propres de  $\mathcal{H}$

## 15.6 Opérateurs unitaires

La notion d'unité est introduite en A ; plus spécifiquement en les définitions A.2 et en A.3. En utilisant les notations introduites dans en IV, nous pouvons réécrire cela sous la forme

$$U^{-1} = U^\dagger \quad (\text{V.12})$$

$$UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{I} \quad (\text{V.13})$$

**Proposition 15.2.** Soit  $U$  une application unitaire. Soient  $|\Psi\rangle, |\varphi\rangle$  deux kets. Notons

$$\begin{aligned} |\tilde{\Psi}\rangle &= U|\Psi\rangle \\ |\tilde{\varphi}\rangle &= U|\varphi\rangle. \end{aligned}$$

Alors, le produit scalaire est conservé :

$$\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi | \varphi \rangle. \quad (\text{V.14})$$

**Proposition 15.3.** Soit  $\{|i\rangle\}$  une base orthonormée et  $U$  une matrice unitaire. Alors,  $\{U|i\rangle\} = |i\rangle$  est également une base orthonormée et

$$|\tilde{i}\rangle = U|i\rangle = \sum_j |j\rangle \langle j| U|i\rangle = \sum_j |j\rangle U_{ji} \quad (\text{V.15})$$

est la matrice de changement de base.

**Proposition 15.4.** Si  $U$  et  $V$  sont des matrices unitaires, alors  $UV$  est unitaire.

**Proposition 15.5.** Si  $U$  est unitaire et  $|\Psi\rangle$  est un vecteur propre de  $U$

$$U|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \quad \rightarrow \|\lambda\|^2 = 1. \quad (\text{V.16})$$

De plus,  $\lambda = e^{i\varphi}$ . Nous pouvons diagonaliser une matrice unitaire

$$U = \sum_j e^{i\varphi_j} |j\rangle \langle j| \quad (\text{V.17})$$

Où  $\{|j\rangle\}$  est une base orthonormée de vecteurs propres.

**Théorème 15.1.** Si  $U$  est une matrice  $n \times n$  telle que  $\langle \Psi | U^\dagger U | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle$  pour tout  $|\Psi\rangle$ , alors  $U$  est unitaire<sup>14</sup> et donc  $U^\dagger U = \mathbb{I}$ .

*Démonstration.* En utilisant le premier postulat de la Mécanique Quantique, nous pouvons écrire tout état sous la forme  $|\Psi\rangle = |\alpha\rangle + e^{i\varphi} |\beta\rangle$ . Dès lors,

$$\begin{aligned} \langle \Psi | U^\dagger U | \Psi \rangle &= \langle \Psi | \Psi \rangle \\ (|\alpha\rangle + e^{-i\varphi} |\beta\rangle)(U^\dagger U)(|\alpha\rangle + e^{i\varphi} |\beta\rangle) &= (|\alpha\rangle + e^{-i\varphi} |\beta\rangle)(|\alpha\rangle + e^{i\varphi} |\beta\rangle) \\ \langle \alpha | U^\dagger U | \alpha \rangle + e^{-i\varphi} \langle \beta | U^\dagger U | \alpha \rangle + e^{i\varphi} \langle \alpha | U^\dagger U | \beta \rangle + \langle \beta | U^\dagger U | \beta \rangle &= \langle \alpha | \alpha \rangle + e^{-i\varphi} \langle \beta | \alpha \rangle + e^{i\varphi} \langle \alpha | \beta \rangle + \langle \beta | \beta \rangle \end{aligned}$$

Or, nous avons que

$$\langle \alpha | U^\dagger U | \alpha \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle \quad \langle \beta | U^\dagger U | \beta \rangle = \langle \beta | \beta \rangle.$$

---

14. La matrice  $U$  appartient à  $U_n$ , l'ensemble des matrices de taille  $n \times n$  définie en A.2

Dès lors,

$$\begin{aligned}\langle \beta | U^\dagger U | \alpha \rangle &= \langle \beta | \alpha \rangle & \forall |\alpha\rangle |\beta\rangle, \\ \langle \alpha | U^\dagger U | \beta \rangle &= \langle \alpha | \beta \rangle & \forall |\alpha\rangle |\beta\rangle.\end{aligned}$$

Ce qui implique alors que  $U^\dagger U = \mathbb{I}$ . ■

**Proposition 15.6.** *Si  $|\Psi\rangle$  est une solution de l'équation de Schrödinger, alors il existe un opérateur linéaire  $U(t, t_0)$  tel que*

$$|\Psi(t, t_0)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle. \quad (\text{V.18})$$

En utilisant ce résultat, nous obtenons que

$$\begin{aligned}i\partial_t U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle &= H(t) U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle & \forall |\Psi(t_0)\rangle \\ i\partial_t U(t, t_0) &= H(t) U(t, t_0)\end{aligned}$$

Avec la condition initiale  $U(t_0, t_0) = \mathbb{I}$ .

**Proposition 15.7.** *Comme  $\langle \Psi(t_0) | \Psi(t) \rangle$  est indépendant de  $t$ , il s'ensuit que*

$$\langle \Psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle \quad \forall |\Psi(t_0)\rangle. \quad (\text{V.19})$$

Nous avons alors que  $U(t, t_0)$  est une matrice unitaire.

## 16 Fonction d'Opérateurs/de matrices

Soit  $f : \begin{pmatrix} \mathbb{C} & \rightarrow & \mathbb{C} \\ x & \rightarrow & \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \end{pmatrix}$  une fonction qui peut-être représentée par une série. Soit  $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$  une matrice. Alors on étend  $f$  à une fonction sur les matrices par

$$f : \begin{pmatrix} \mathbb{C}^{N \times N} & \rightarrow & \mathbb{C}^{N \times N} \\ A & \rightarrow & \lim_{K \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^K c_n A^n \end{pmatrix} \quad (\text{V.20})$$

lorsque cette limite existe.

**Proposition 16.1.** *Si  $V$  est une matrice inversible  $VV^{-1} = V^{-1}V = \mathbb{I}$ , alors  $f(V^{-1}AV) = V^{-1}f(A)V$*

*Démonstration.*

$$f(V^{-1}AV) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (V^{-1}AV)^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n V^{-1}A^nV = V^{-1}f(A)V$$

**Proposition 16.2.** *Si  $D$  est une matrice diagonale  $D = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_N \end{pmatrix}$ , est  $f(D)$  est diagonale et  $f(D) =$*

$$\begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & f(\lambda_N) \end{pmatrix}.$$

**Lemme 16.1.** *Si  $A$  est une matrice diagonalisable, alors il existe  $V$  inversible tel que  $V^{-1}AV = D$  est diagonale. Alors,  $f(A) = V^{-1}f(D)V$ .*

**Lemme 16.2.** *Si  $A$  est hermitien  $A = A^\dagger$ , alors il existe  $V$  unitaire  $U^{-1} = U^\dagger$  tel que  $A = U^\dagger D U$  où  $D$  est diagonal réel. Alors,  $f(A) = U^\dagger f(D) U$ .*

**Remarque 16.1.** *En notation de Dirac,  $A = \sum_j a_j |j\rangle \langle j|$  et  $f(A) = \sum_j f(a_j) |j\rangle \langle j|$ .*

## Sixième partie

# Applications de la Mécanique Quantique

## 17 Interféromètre de Mech-Zehnder

Cet exemple est tiré de l'optique. Nous allons regarder ce qu'il se passe en optique classique, et nous allons ensuite utiliser le formalisme quantique. Ce faisant, nous pourrions mettre en évidence les différences entre les deux.

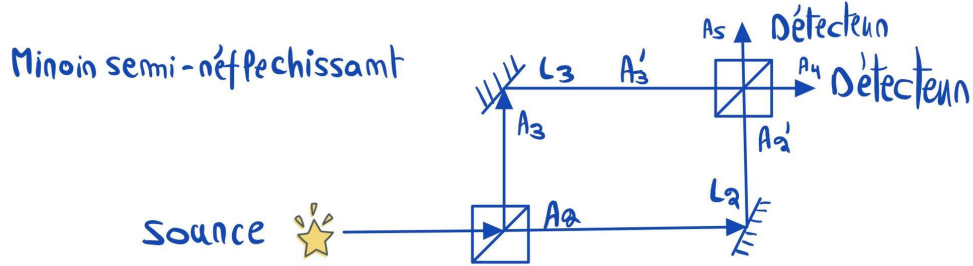


FIGURE 2 – Représentation du principe de l'interféromètre de Mach-Zehnder. Notons que les longueurs  $L_i$  représentent la longueur totale du trajet dans le chemin  $i$  suivit.

### 17.1 Lumière classique

Au niveau des détecteurs, plusieurs chemins sont possibles, comme l'illustre l'image ci-contre.

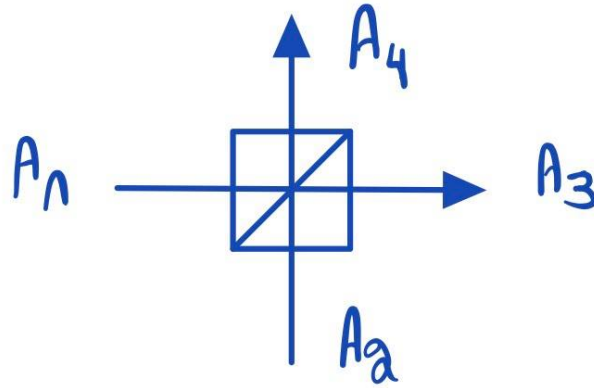


FIGURE 3 – Les ondes incidentes - arrivants de deux endroits différents, respectivement  $A_1$  et  $A_2$  peuvent suivre deux chemins différents :  $A_3$  et  $A_4$ .

En supposant partant de la description d'une onde plane, nous pouvons écrire

$$A_1(t) = A_1 e^{-i\omega t}, \quad (\text{VI.1a})$$

$$A_2(t) = A_2 e^{-i\omega t}, \quad (\text{VI.1b})$$

pour les ondes incidentes, ainsi que

$$A_3(t) = \cos \theta A_1 e^{-i\omega t} + i \sin \theta A_2 e^{-i\omega t} \quad (\text{VI.2a})$$

$$A_4(t) = \cos \theta A_2 e^{-i\omega t} + i \sin \theta A_1 e^{-i\omega t} \quad (\text{VI.2b})$$

pour les ondes sortantes.

**Remarque 17.1.** Par convention, les ondes transmises ne subissent aucun déphasage, là où les ondes réfléchies bénéficient d'un déphasage de  $\pi/2$ . D'autres conventions sont possibles.

Notons que nous pouvons introduire un facteur  $e^{ikL}$  tenant compte de la distance parcourue, i.e. un point en  $x = 0$  peut-être décrit par  $A(t) = Ae^{-i\omega t}$  et un point en  $x = L$  peut-être décrit par  $A'(t) = Ae^{-i\omega t}e^{ikL}$ . Le détecteur est de sorte que  $I(t) = e\|A(t)\|^2$ . Soit

$$A(t) = Ae^{-i\omega t} \quad I_{Initial} = \|A(t)\|^2$$

Nous avons alors que

$$A_2(t) = \frac{A(t)}{\sqrt{2}} \quad A_3(t) = i \frac{A(t)}{\sqrt{2}}$$

En particulier, nous pouvons écrire les chemins  $A'_2$  et  $A'_3$  de 3 selon

$$A'_2(t) = A_2(t)e^{ikL_2} \quad (VI.3a)$$

$$A'_3(t) = A_3(t)e^{ikL_3} \quad (VI.3b)$$

$$A_4(t) = \frac{A'_3(t)}{\sqrt{2}} + i \frac{A'_2(t)}{\sqrt{2}} = \frac{A_3(t)e^{ikL_3}}{\sqrt{2}} + i \frac{A_2(t)e^{ikL_2}}{\sqrt{2}} = i \frac{A}{2} (e^{ikL_3} + e^{ikL_2}) \quad (VI.3c)$$

$$A_5(t) = \frac{A'_2(t)}{\sqrt{2}} + i \frac{A'_3(t)}{\sqrt{2}} = \frac{A_2(t)e^{ikL_2}}{\sqrt{2}} + i \frac{A_3(t)e^{ikL_3}}{\sqrt{2}} = i \frac{A}{2} (-e^{ikL_3} + e^{ikL_2}) \quad (VI.3d)$$

En introduisant le terme  $\Delta\Phi = kL_3 - kL_2$ , nous pouvons conclure que

## 17.2 Lumière quantique

La ligne d'au-dessus est à compléter L'algèbre est la même : l'interprétation change.

## 18 Oscillations de neutrinos

Les neutrinos sont des particules neutres, interagissant très faiblement avec la matière. Elle fût prédite par Pauli pour expliquer le spectre des  $e^-$  dans la désintégration du  $\beta : n \Rightarrow p^+ + e^- + \nu$ .

## 19 MASER $NH_3$

Dans cette section, nous allons discuter d'un appareil fort pratique : le MASER<sup>15</sup> d'ammonium  $NH_3$  ; l'un des ancêtres des LASER<sup>16</sup>

## 20 Spin $\frac{1}{2}$

Nous voyons en cette section une très brève introduction à la quantification du moment angulaire en Mécanique Quantique. Pour ce faire, introduisons le Groupe des Rotations.

Considérons l'ensemble des matrices  $R \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$  telle que  $R^T R = \mathbb{I}$ . Si  $\mathbf{n}$  est un vecteur unitaire de  $\mathbb{R}^3$  et  $\theta$  un angle, alors  $R(\theta, \mathbf{n})$  est la rotation (en son sens anti-horlogique) autour de l'axe  $\mathbf{n}$  d'angle  $\theta$ .

$$\begin{aligned} R(\theta, x) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_x) & L_x &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \\ R(\theta, y) &= \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_y) & L_y &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ R(\theta, z) &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \exp(i\theta L_z) & L_z &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

15. Acronyme anglais pour 'Microwave Amplicifaction by Stimulated Emission of Radiation'.

16. Acronyme anglais pour 'Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation'.

Nous avons alors que  $R(\theta, \mathbf{n}) = \exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{L})$ , où  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{L} = n_i L_i$ . Les vecteurs  $L_x, L_y, L_z$  sont appelés les *générateurs du Groupe des Rotations*.

En physique, de nombreux objets (et non pas seulement les vecteurs) sont invariants ou se transforment sous l'effet d'une rotation. Une autre représentation du Groupe des Rotations est l'ensemble des 3 opérateurs  $J_x, J_y, J_z$  tels que  $[J_x, J_y] = J_z$  (ainsi que toute permutation cyclique de cela) et tel que, sous toute rotation d'angle  $\theta$  autour de  $\mathbf{n}$ , un état  $|\Psi\rangle$  se transforme en

$$|\Psi\rangle \rightarrow \exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) |\Psi\rangle \quad (\text{VI.5})$$

**Exemple 20.1.** Les opérateurs

- $J_x = yp_z - zp_y$
- $J_y = zp_x - xp_z$
- $J_z = xp_y - yp_x$  sont des exemples de représentation du Groupe des Rotations.

Un système est invariant par rotation lorsque

$$\exp(-itH) \exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) |\Psi\rangle = \exp(i\theta \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) \exp(-itH) |\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle, \forall \mathbf{n}, \theta, t$$

Cela revient à dire que *faire une rotation* et ensuite *évoluer dans le temps* est identique à *évoluer dans le temps* et puis *faire une rotation*.

**Lemme 20.1.** Pour  $\theta$  et  $t$  infinitésimaux, nous avons que

$$[H, J_x] = [H, J_y] = [H, J_z] = 0 \quad (\text{VI.6})$$

Les conséquences en sont nombreuses. Nous avons notamment alors que :

1. Si  $|\Psi(t)\rangle$  est une solution de l'équation de Schrödinger (??), alors  $\langle \Psi(t) | J_x | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | J_x | \Psi(0) \rangle$ .
2. Si  $|\Psi\rangle$  est un vecteur propre de  $J_x$ ,

$$J_x |\Psi\rangle = j |\Psi\rangle \quad (\text{VI.7})$$

alors  $|\Psi(t)\rangle = \exp(-iHt) |\Psi\rangle$  est aussi un vecteur propre de  $J_x$ .

Le Théorème d'Emmy Noether nous apprend que la grandeur conservée par la symétrie de rotation est le moment angulaire.

## 20.1 Quantification du moment angulaire

**Théorème 20.1.** Soit  $[J_x, J_y] = iJ_z$ . Nous avons alors que les valeurs propres de  $J_z$  est un demi-entier :  $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

$$J_z |\Psi\rangle = m |\Psi\rangle$$

**Théorème 20.2.** Il existe une représentation non triviale du Groupe des Rotations par des matrices  $d \times d$ . Dans ce cas,  $J_z = -\frac{d}{2}, -\frac{d}{2} + 1, \dots, +\frac{d}{2}$ .

**Exemple 20.2.** Le cas le plus simple est celle des matrices de Pauline (matrices  $2 \times 2$ ) :

$$\left. \begin{array}{l} \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ J_x = \frac{1}{2} \sigma_x \end{array} \right| \left. \begin{array}{l} \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ J_y = \frac{1}{2} \sigma_y \end{array} \right| \left. \begin{array}{l} \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ J_z = \frac{1}{2} \sigma_z \end{array} \right|$$

Nous pouvons vérifier que les différentes relations démontrées ci-dessus sont respectées (exercice).



## Septième partie

# Représentations de la position et de l'impulsion en Mécanique Quantique

Dans ce chapitre, nous allons de nouveau considérer une particule ; en particulier, nous voulons pouvoir définir les notions de position et d'impulsion.

Nous allons travailler dans les espaces de Hilbert  $L_2(\mathbb{R})$  ou  $L_2(\mathbb{R}^3)$ . Nous aurons alors des fonctions de carré sommable. Dans ces espaces, *les opérateurs position  $X$  et impulsion  $P$  n'ont pas de vecteurs propres*. Nous pouvons néanmoins faire comme si ils en avaient : nous expliqueront ultérieurement comment nous pouvons justifier cette approche.

Introduisons les notations :

$ x_0\rangle$	Etat propre de l'opérateur $X$ de valeur propre $x_0$ . Cela correspond à la "fonction d'onde" $\delta(x - x_0)$ .
$ p_0\rangle$	Etat propre de l'opérateur $P$ de valeur propre $p_0$ . Cela correspond à la "fonction d'onde" $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}}$

Nous pouvons effectuer plusieurs opérations sur ces objets.

### 1. Normalisation

Nous voulons calculer  $\langle x_0|x'_0\rangle$  et  $\langle p_0|p'_0\rangle$ .

$$\begin{aligned}\langle x_0|x'_0\rangle &= \int dx \delta(x - x_0) \delta(x - x'_0) = \delta(x_0 - x'_0) \\ \langle p_0|p'_0\rangle &= \int dx \frac{e^{-i\frac{p_0 x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{e^{i\frac{p'_0 x}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \\ &= \int du \frac{e^{-i(p_0 - p'_0)u}}{2\pi} \qquad u = \frac{x}{\hbar} \\ &= \delta(p_0 - p'_0)\end{aligned}$$

Ce faisant, nous montrons que les deux bases définies par ces opérations sont orthonormées.

2. A partir de là, nous obtenons les relations fondamentales suivantes :

$$\left. \begin{aligned} \langle x_0|x'_0\rangle &= \delta(x_0 - x'_0) \\ \int d^3x_0 |x_0\rangle \langle x_0| &= \mathbb{I} \end{aligned} \right| \left. \begin{aligned} \langle p_0|p'_0\rangle &= \delta(p_0 - p'_0) \\ \int dp_0 |p_0\rangle \langle p_0| &= \mathbb{I} \end{aligned} \right|$$

Nous avons alors deux relations de *complétude*, ou de *fermeture*.

3. Considérons un état quantique  $|\Psi\rangle$ , correspondant à la fonction d'onde  $\Psi(x)$ . En exploitant les relations de fermetures définies ci-dessus, nous pouvons alors écrire l'état quantique sous les deux formes suivantes :

$$|\Psi\rangle = \int d^3x_0 |x_0\rangle \langle x_0| \Psi\rangle \tag{VII.1}$$

$$|\Psi\rangle = \int d^3p_0 |p_0\rangle \langle p_0| \Psi\rangle \tag{VII.2}$$

# Huitième partie

## Appendice

### A Résultats élémentaires d'Algèbre Linéaire

Rappelons une série de résultats classiques d'Algèbre Linéaire pertinents à la Mécanique Quantique.

**Définition A.1** (Produit Hermitien). *Soit  $V$  un espace vectoriel sur  $\mathbb{C}$ . On y définit le produit hermitien, c'est à dire une application*

$$\begin{aligned} V \times V &\rightarrow \mathbb{C} \\ (\mathbf{x}, \mathbf{y}) &\rightarrow \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \end{aligned}$$

tel que  $\forall x, y, x', y' \in V$ , et tout  $\lambda \in \mathbb{C}$ ,

1.  $y \cdot x = \bar{x} \cdot \bar{y}$
2.  $(x + x') \cdot y = x \cdot y + x' \cdot y$ , et  $x \cdot (y + y') = x \cdot y + x \cdot y'$
3.  $(\lambda x) \cdot y = \lambda(x \cdot y)$  et  $x \cdot (\lambda y) = \bar{\lambda}(x \cdot y)$
4.  $x \cdot x \in \mathbb{R}_{\geq 0} \forall x$ , et  $x \cdot x = 0$  si et seulement si  $x = 0$ .

Un espace hermitien est un espace vectoriel  $V$  sur  $\mathbb{C}$  muni d'un produit hermitien.

**Proposition A.1.** *Soit  $V$  un espace Hermitien de dimension  $n$ . Si  $E \doteq (e_1, \dots, e_n)$  est un ensemble de vecteurs deux à deux orthogonaux, alors  $E$  est une base de  $V$ .*

**Proposition A.2.** *Soit  $V$  un espace Hermitien. Alors il existe une base orthonormale  $V$ .*

Nous pouvons utiliser l'algorithme de Gram-Schmidt pour orthogonaliser une base de  $V$  d'un espace vectoriel sur  $\mathbb{C}$  ou  $\mathbb{R}$ .

**Définition A.2.** *Une matrice  $a \in GL(V_{\mathbb{C}})$  est unitaire si  $a^{-1} = \bar{a}^T$ . L'ensemble des matrices unitaires de taille  $n \times n$  est dénotée par  $U_n$ .*

**Définition A.3.** *Une matrice  $a \in Mat(\mathbb{C})$  est Hermitienne si  $\bar{a}^T = a$ .*

**Proposition A.3.**  *$A$  est une isométrie si et seulement si  $a$  est unitaire (si  $V_{\mathbb{C}}$ ).*

Voici une série de propriétés classiques des isométries :

1. Les isométries conservent les distances (normes) et les angles.
2. Supposons que  $E$  est orthonormale. Alors  $A$  est une isométrie si et seulement si les vecteurs qui forment les colonnes de  $a$  sont :
  - (a) deux à deux orthogonaux
  - (b) de norme 1.
3. Si  $\lambda$  est une valeur propre de  $A$ , alors  $|\lambda| = 1$ .
4. Si  $A$  est une isométrie, alors  $|\det(a)| = 1$ .
5. Si  $E$  et  $F$  sont des bases orthonormales de  $V$ , alors il existe une unique isométrie  $A$  tel que  $A(e_i) = f_i$ .
6. Tous les éléments de  $O_3$  sont d'un des trois types suivants :
  - (a) Rotations autour d'une droite passant par l'origine.
  - (b) Symétries par rapport à un plan passant par l'origine.
  - (c) Une composition d'isométries de type (I) et (II).

**Lemme A.1.** *Toutes les valeurs propres d'une matrice Hermitienne sont réelles.*

**Théorème A.1.** *Soit  $a \in Mat_{n \times n}(\mathbb{C})$  Hermitienne. Il existe une base orthonormale de  $V$  contenant que des vecteurs propres de  $a$ . En d'autres mots, il existe une matrice  $O$ , unitaire, tel que*

$$O^{-1}aO = \bar{O}^T a O \quad (\text{VIII.1})$$

**Définition A.4.** *Soit  $\mathbb{H}$  un espace de Hilbert.  $\mathbb{H}$  est séparable si il possède une base dénombrable.*

**Remarque A.1.** *Soit  $u_i$  une base  $\forall i \in \mathbb{N}$ . Par Gram-Schmidt, nous pouvons prendre la base orthonormée  $(u_i, u_j) = \delta_{ij}$ .*