

Mécanique Quantique

26 Mars, 2023

Lucas

1. Introduction

La mécanique quantique est une théorie fondamentale de la physique qui décrit les propriétés physiques de la nature à l'échelle des atomes et des particules subatomiques. Elle est le fondement de toute la physique quantique, y compris la chimie quantique, la théorie quantique des champs, la technologie quantique et la science de l'information quantique.

La mécanique quantique diffère de la physique classique à bien des égards, notamment :

- La quantification : en mécanique quantique, l'énergie, la quantité de mouvement, le moment angulaire et d'autres quantités sont souvent limités à des valeurs discrètes.
- La dualité onde-particule : les objets ont des caractéristiques à la fois de particules et d'ondes.
- Le principe d'incertitude : étant donné un ensemble complet de conditions initiales, il existe des limites à la précision avec laquelle la valeur d'une quantité physique peut être prédite avant sa mesure.
- L'intrication quantique : des objets peuvent être liés entre eux de telle sorte qu'ils partagent le même destin, même s'ils sont séparés par une grande distance.

La mécanique quantique a joué un rôle important dans le développement de nombreuses technologies modernes, notamment les lasers, les transistors et les armes nucléaires. Elle est également essentielle pour comprendre de nombreux processus fondamentaux dans la nature, tels que le comportement des atomes et des molécules, la structure des matériaux et la nature de la lumière. Ce cours propose une introduction aux concepts de base de la mécanique quantique. Nous discuterons de la fonction d'onde, de l'équation de Schrödinger et du principe d'incertitude. Nous aborderons aussi certaines applications de la mécanique quantique, telles que les lasers et les transistors.

2. Cours associés

- Mécanique de Lagrange
- La théorie des champs quantiques

3. Histoire

3.1. Quanta

Un quanta est la plus petite unité d'énergie pouvant être absorbée ou émise. C'est la particule fondamentale de la lumière, et c'est aussi l'énergie transportée par d'autres particules, telles que les électrons et les protons.

L'histoire de la découverte des quanta est longue et sinieuse. Le premier soupçon d'existence d'un quanta est apparu au début des années 1900, lorsque les physiciens étudiaient le comportement de la lumière. Ils ont découvert que la lumière pouvait être émise en unités discrètes et que ces unités étaient proportionnelles à la fréquence de la lumière. Cette découverte a conduit au développement de la théorie quantique, qui est la branche de la physique qui traite du comportement de la matière et de l'énergie au niveau atomique et subatomique.

La théorie quantique a révolutionné notre compréhension de l'univers et a conduit au développement de nombreuses nouvelles technologies, telles que les lasers et l'énergie nucléaire. Il s'agit toujours

d'un domaine de recherche actif, et les scientifiques apprennent constamment de nouvelles choses sur le fonctionnement des quanta.

Le terme « quanta » a été utilisé pour la première fois en 1905 par Max Planck, un physicien allemand. Planck essayait d'expliquer le spectre de rayonnement du corps noir, c'est-à-dire la distribution de l'énergie émise par un corps noir à différentes longueurs d'onde. Il a découvert qu'il ne pouvait expliquer le spectre que s'il supposait que la lumière était émise en unités discrètes, qu'il a appelées quanta.

3.2. Dualité onde-corpuscule

La dualité onde-particule est le concept de la mécanique quantique selon lequel toute particule ou entité quantique peut être décrite soit comme une onde, soit comme une particule. Elle exprime l'incapacité des concepts classiques de « particule » ou d'"onde" à décrire pleinement le comportement des objets à l'échelle quantique. Comme l'a écrit Albert Einstein : « Il semble que nous devions utiliser tantôt l'une, tantôt l'autre théorie, et tantôt l'une ou l'autre. Nous sommes confrontés à un nouveau type de difficulté. Nous avons deux images contradictoires de la réalité ; séparément, aucune d'entre elles n'explique totalement les phénomènes lumineux, mais ensemble, elles le font.

La dualité onde-particule a été découverte pour la première fois par le physicien français Louis de Broglie en 1924. De Broglie a proposé que toutes les particules aient une longueur d'onde, et que cette longueur d'onde soit inversement proportionnelle à l'élan de la particule. En d'autres termes, plus la longueur d'onde est courte, plus l'élan de la particule est important.

L'hypothèse de De Broglie a été confirmée par l'expérience de Davisson-Germer en 1927. Dans cette expérience, un faisceau d'électrons a été diffusé à partir d'un cristal. On a constaté que les électrons interféraient les uns avec les autres, comme le feraient des ondes. Cette expérience a confirmé que les électrons peuvent se comporter comme des ondes.

La dualité onde-particule est l'un des concepts les plus importants de la mécanique quantique. Elle est à la base de nombreux effets étranges observés dans le monde quantique, tels que l'effet tunnel quantique et l'intrication quantique.

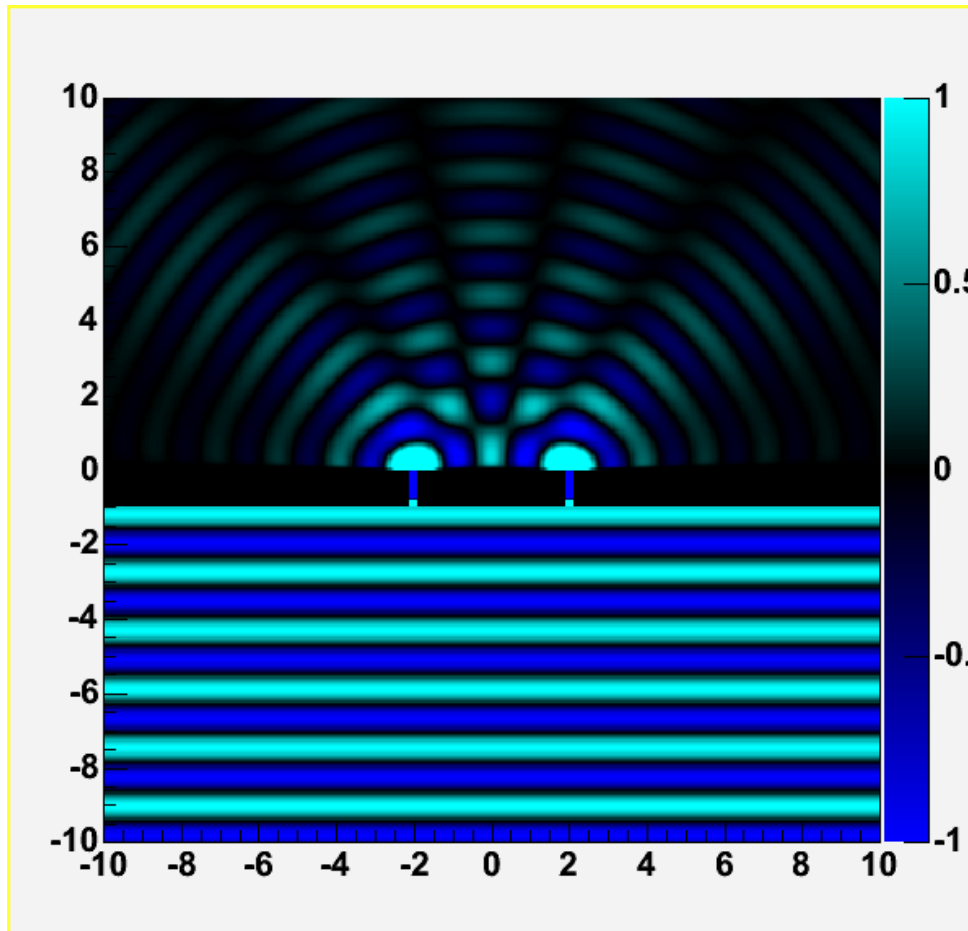


Figure 1: Image d'une onde dans l'expérience de la double fente

Cette image montre comment une onde peut interférer avec elle-même. Les ondes sont représentées par les lignes bleues. Les zones bleu clair représentent les zones où les ondes sont en phase, et les zones bleu foncé représentent les zones dans lesquelles les ondes sont déphasées. Comme vous pouvez le voir, les ondes peuvent interférer les unes avec les autres pour créer des motifs clairs et sombres.

C'est un bon exemple de la façon dont les ondes peuvent se comporter comme des particules. Les ondes de cette image sont en fait des électrons qui interfèrent les uns avec les autres pour créer un motif. Ce n'est qu'un exemple de la manière dont la dualité onde-particule se manifeste dans le monde quantique.

3.3. Le problème de la mesure

Le problème de la mesure est un problème fondamental de la mécanique quantique. Il s'agit de réconcilier la fonction d'onde d'un système quantique avec les résultats des mesures classiques. La fonction d'onde d'un système quantique est une fonction mathématique qui décrit l'état du système. Les résultats des mesures sont les valeurs que nous observons lorsque nous mesurons le système.

L'effondrement de la fonction d'onde est le processus par lequel la fonction d'onde d'un système quantique change lorsqu'elle est mesurée. La fonction d'onde s'effondre en un seul état, et on dit que le système est dans un état propre. L'état propre est l'état qui correspond au résultat de la mesure.

Le problème de la mesure a été proposé pour la première fois par Niels Bohr en 1928. Bohr a soutenu que l'effondrement de la fonction d'onde est une conséquence nécessaire de l'interaction du système quantique avec l'appareil de mesure. L'appareil de mesure est un système classique, et il ne peut pas interagir avec le système quantique sans le perturber.

Il existe de nombreuses interprétations différentes de la mécanique quantique et chaque interprétation a sa propre façon d'expliquer le problème de la mesure. L'interprétation la plus populaire de la mécanique quantique est l'interprétation de Copenhague. Selon cette interprétation, l'effondrement de la fonction d'onde est un événement réel, qui se produit lorsque le système quantique interagit avec l'appareil de mesure.

3.4. Intrication quantique

L'intrication est un phénomène dans lequel deux ou plusieurs particules quantiques sont liées de telle sorte qu'elles partagent le même destin, même lorsqu'elles sont séparées par une grande distance. Par exemple, si deux électrons sont intriqués, ils auront toujours le même spin, même s'ils sont séparés par un continent.

L'intrication a été découverte pour la première fois par Albert Einstein, Boris Podolsky et Nathan Rosen en 1935. Ils ont proposé une expérience consistant à séparer une paire de particules intriquées et à mesurer leurs propriétés. Ils ont constaté que les propriétés des particules étaient toujours corrélées, même si elles étaient séparées par une grande distance. Cette expérience a montré que l'intrication est un phénomène réel, qui a depuis été confirmé par de nombreuses autres expériences.

Cependant, il est important de noter que l'intrication ne peut pas être utilisée pour communiquer des informations à une vitesse supérieure à celle de la lumière. En effet, l'information partagée entre les particules intriquées n'est pas réellement transmise entre elles. Au lieu de cela, les particules se trouvent simplement dans un état dans lequel elles partagent le même destin.

4. Fondements mathématiques de la mécanique quantique

4.1. Fonction d'onde

La fonction d'onde est une fonction mathématique qui décrit l'état d'un système quantique. Il s'agit d'une fonction à valeurs complexes, dont le carré donne la probabilité de trouver la particule en un point particulier de l'espace. La fonction d'onde peut être utilisée pour calculer l'énergie de la particule, sa quantité de mouvement et d'autres propriétés.

Un exemple de fonction d'onde est la fonction d'onde d'une particule dans une boîte. Cette fonction d'onde est une onde sinusoïdale dont la longueur d'onde et l'amplitude varient en fonction de l'énergie de la particule. Le carré de la fonction d'onde d'une particule dans une boîte donne la probabilité de trouver la particule en un point particulier de la boîte.

Un autre exemple de fonction d'onde est la fonction d'onde d'un électron libre. Cette fonction d'onde est une onde sphérique dont la longueur d'onde et l'amplitude varient en fonction de l'énergie de l'électron. Le carré de la fonction d'onde d'un électron libre donne la probabilité de trouver l'électron en un point particulier de l'espace.

La fonction d'onde est un concept très important en mécanique quantique, et elle a de nombreuses applications dans la théorie des ondes et des particules. En comprenant la fonction d'onde, nous pouvons mieux comprendre le comportement des systèmes quantiques.

Voici un exemple de fonction d'onde pour une particule dans une boîte :

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

où n est un entier et L la longueur de la boîte. La longueur d'onde de cette fonction d'onde est $\lambda = 2\frac{L}{n}$, et l'amplitude est $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$. Le carré de cette fonction d'onde donne la probabilité de trouver la particule en un point particulier de la boîte.

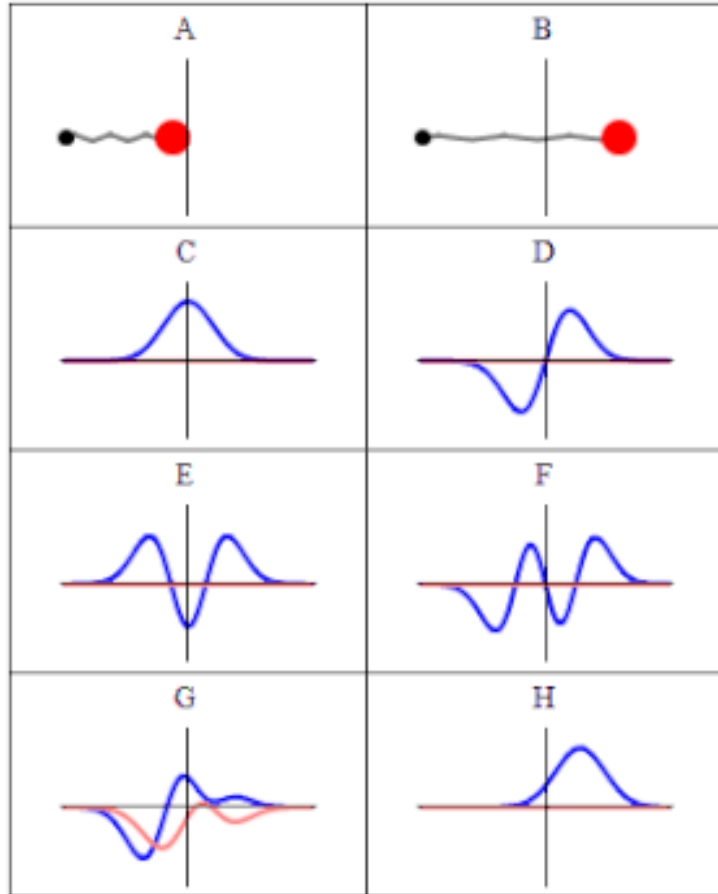


Figure 2: Representation de fonction d'onde

4.2. Espaces de Hilbert et vecteurs d'état

La mécanique quantique est une théorie mathématique qui utilise des *espaces de Hilbert* pour représenter les **états quantiques d'un système**. Un *espace de Hilbert* est un **espace vectoriel complexe** avec une structure interne qui permet de définir une notion de distance et de convergence, nommé produit interne. Les *vecteurs d'état* quantique sont des éléments de cet espace de Hilbert et représentent l'état quantique d'un système. Les vecteurs d'état sont généralement notés $|\psi\rangle$ et peuvent être exprimés comme une **combinaison linéaire de vecteurs de base appelés états propres**.

4.2.1. Produit Scalaire (Produit interne)

Le produit scalaire correspond pour deux vecteurs de taille n $\vec{u} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ $x_i \in \mathbb{C}$ et $\vec{v} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$ $y_i \in \mathbb{C}$ à

$$\langle u | v \rangle = \sum_{i=1}^n x_i^* y_i \in \mathbb{C}$$

avec $*$ le conjugué

4.2.1.1. Linéarité et anti-linéarité

Le produit scalaire est linéaire à droite et anti-linéaire à gauche

- $\langle u | v_1 + v_2 \rangle = \langle u | v_1 \rangle + \langle u | v_2 \rangle$
- $\langle u_1 + u_2 | v \rangle = \langle u_1 | v \rangle + \langle u_2 | v \rangle$
- $\langle u | \lambda v \rangle = \lambda \langle u | v \rangle$
- $\langle u | \lambda v \rangle = \lambda \langle u | v \rangle$ $\lambda \in \mathbb{C}$
- $\langle \lambda u | v \rangle = \lambda^* \langle u | v \rangle$ $\lambda \in \mathbb{C}$

Ex.

- $\langle u | (2 + 3i)v \rangle = (2 + 3i)\langle u | v \rangle$
- $\langle (2 + 3i)u | v \rangle = (2 - 3i)\langle u | v \rangle$

4.2.1.2. Norme

$\vec{u} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \parallel \vec{u} \parallel = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2} \in \mathbb{R}_+$ avec $|x|$ le module de x soit pour un nombre complexe $z = a + ib$ le module de z est $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$ par conséquent

$$\parallel \vec{u} \parallel^2 = |x_1|^2 + |x_2|^2 + \dots + |x_n|^2$$

puisque $|z|^2 = a^2 + b^2 = z^* \cdot z \rightarrow \parallel u \parallel = \sqrt{\langle u | u \rangle}$

4.2.1.3. Orthogonalité

Deux vecteurs sont orthogonaux si $\langle u | v \rangle = 0$

4.2.1.4. Symétrie

$$\langle u | v \rangle = (\langle v | u \rangle)^*$$

4.3. Opérateurs et observables

Les *opérateurs quantiques* sont des **transformations linéaires** qui agissent sur les vecteurs d'état quantique pour produire de nouveaux vecteurs d'état. Les *observables* sont des grandeurs physiques qui peuvent être mesurées expérimentalement, telles que la **position**, la **quantité de mouvement** et l'**énergie**. Les observables sont représentées par des *opérateurs hermitiens*. Les valeurs propres de ces opérateurs sont les valeurs possibles pour les mesures de l'observable correspondante.

4.3.1. Opérateurs linéaires

Un opérateur linéaire est une fonction L qui fait correspondre des vecteurs d'un espace vectoriel V à des vecteurs d'un autre espace vectoriel W , de telle sorte que pour tout vecteur x et y dans V et tout scalaire c ,

$$\hat{L}(|x\rangle + |y\rangle) = \hat{L}(|x\rangle) + \hat{L}(|y\rangle) \quad \hat{L}(c|x\rangle) = c\hat{L}(|x\rangle)$$

La notation d'un opérateur linéaire est généralement un chapeau, \hat{L} . Par exemple, l'opérateur linéaire qui prend un vecteur x à sa transposée est désigné par \hat{T} .

En mécanique quantique, les opérateurs linéaires sont utilisés pour représenter les observables. Par exemple, l'opérateur linéaire qui représente la position d'une particule est désigné par \hat{x} . La formule de la valeur espérée d'une observable O est donnée par

$$\langle O \rangle = \int \psi^* O \psi dx$$

où ψ est la fonction d'onde de la particule.

4.3.2. États propres et valeurs propres

Un observable est une quantité qui peut être mesurée dans un système quantique. Les observables ont des valeurs propres, qui sont les valeurs possibles que l'observable peut prendre. Les états propres sont les états d'un système quantique qui correspondent aux valeurs propres d'un observable.

Les trois règles concernant les états propres et les valeurs propres des observables sont les suivantes :

1. Les observables ont des valeurs propres réelles.
2. Les états propres des observables doivent couvrir tout l'espace vectoriel.
3. Les états propres doivent être mutuellement orthogonaux.

Exemple:

Énergie potentielle

L'énergie potentielle d'un système quantique est l'énergie que le système possède en raison de sa position. L'opérateur d'énergie potentielle est désigné par \hat{V} .

La formule de l'énergie potentielle est donnée par

$$\hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

où ∇^2 est l'opérateur Laplacien.

L'opérateur d'énergie potentielle peut être utilisé pour trouver les valeurs propres et les états propres de l'atome d'hydrogène. Les valeurs propres de l'atome d'hydrogène sont données par

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

où n est un nombre entier. Les états propres de l'atome d'hydrogène sont donnés par les fonctions d'onde

$$\psi_n(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi a_0^3}} \left(\frac{n^2}{r}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-n^2 \frac{r}{2a_0}} e^{im\theta} e^{in\varphi}$$

où a_0 est le rayon de Bohr.

Les états propres de l'atome d'hydrogène sont mutuellement orthogonaux et couvrent tout l'espace vectoriel.

4.4. Le formalisme de Dirac

Le formalisme de Dirac est une notation mathématique pour la mécanique quantique qui utilise des notations spéciales pour les vecteurs d'état et les opérateurs. Dans cette notation, les vecteurs d'état sont représentés sous forme de ket $|\psi\rangle$ et les vecteurs duale, qui sont les vecteurs adjoints, sont représentés sous forme de bra $\langle\psi|$. Lorsque l'on prend le produit scalaire d'un ket avec un bra, on obtient une expression appelée le bra-ket, notée $\langle\psi|\varphi\rangle$, qui représente la probabilité de transition entre les deux états quantiques. Le formalisme de Dirac permet également de représenter les opérateurs quantiques sous forme de notations spéciales, telles que l'opérateur identité, l'opérateur de projection et l'opérateur de translation. Cette notation simplifie considérablement les calculs en mécanique quantique et permet une compréhension plus intuitive de la théorie.

4.4.1. Bra-Ket notation

La notation de Bra-ket est une notation pour l'algèbre linéaire et les opérateurs linéaires sur des espaces vectoriels complexes ainsi que leur espace dual, à la fois en dimension finie et en dimension infinie. Elle est spécifiquement conçue pour faciliter les types de calculs qui se présentent fréquemment en mécanique quantique. Son utilisation en mécanique quantique est très répandue. De nombreux phénomènes expliqués à l'aide de la mécanique quantique sont expliqués à l'aide de la notation bra-ket.

Dans la notation bra-ket, un bra est désigné par $\langle\psi|$ et un ket est désigné par $|\varphi\rangle$. Un bra est une fonction linéaire, ce qui signifie qu'il prend un vecteur en entrée et renvoie un nombre complexe. Un ket est un vecteur, ce qui signifie qu'il prend un nombre complexe en entrée et renvoie un vecteur.

La représentation matricielle d'un bra est un vecteur ligne et la représentation matricielle d'un ket est un vecteur colonne. Le produit intérieur d'un bra et d'un ket est un nombre complexe.

La notation bra-ket est liée au produit intérieur de la manière suivante :

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\varphi(x)dx$$

où $\psi^*(x)$ est le conjugué complexe de $\psi(x)$. Le produit intérieur est une mesure du chevauchement entre deux fonctions.

La notation bra-ket est un outil très utile en mécanique quantique, et elle a de nombreuses applications dans la théorie des ondes et des particules. En comprenant la notation bra-ket, nous pouvons mieux comprendre le comportement des systèmes quantiques.

4.5. Distribution de Dirac

La fonction delta de Dirac est une fonction définie comme nulle partout sauf au point $x=0$, où elle est infinie. Elle est souvent désignée par la lettre grecque delta, $\delta(x)$. La fonction delta de Dirac a de nombreuses applications en mécanique quantique, où elle est utilisée pour représenter des particules ponctuelles et d'autres objets ayant une très petite étendue spatiale.

Un exemple d'utilisation de la fonction delta de Dirac en mécanique quantique est l'intégrale de la fonction d'onde. L'intégrale de la fonction d'onde est un moyen de calculer la probabilité qu'une particule se trouve à un endroit donné. L'intégrale de la fonction d'onde est définie comme suit :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \delta(x - x_0) dx$$

où $\psi(x)$ est la fonction d'onde de la particule et x_0 est l'endroit où la particule est trouvée. La fonction delta de Dirac dans cette intégrale nous indique que nous sommes uniquement intéressés à trouver la particule à l'endroit x_0 , et que la probabilité de trouver la particule n'importe où ailleurs est nulle.

La fonction delta de Dirac est également utilisée dans la définition de l'opérateur de quantité de mouvement. L'opérateur de quantité de mouvement est un opérateur mathématique qui représente la quantité de mouvement d'une particule. L'opérateur de quantité de mouvement est défini comme suit

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

où i est l'unité imaginaire et \hbar est la constante de Planck réduite. La fonction delta de Dirac dans cette définition nous indique que nous ne nous intéressons qu'à la dérivée de la fonction d'onde à l'endroit $x = 0$, et que la valeur de la dérivée partout ailleurs est nulle.

La fonction delta de Dirac est un outil très utile en mécanique quantique, et elle a de nombreuses applications dans la théorie des ondes et des particules.

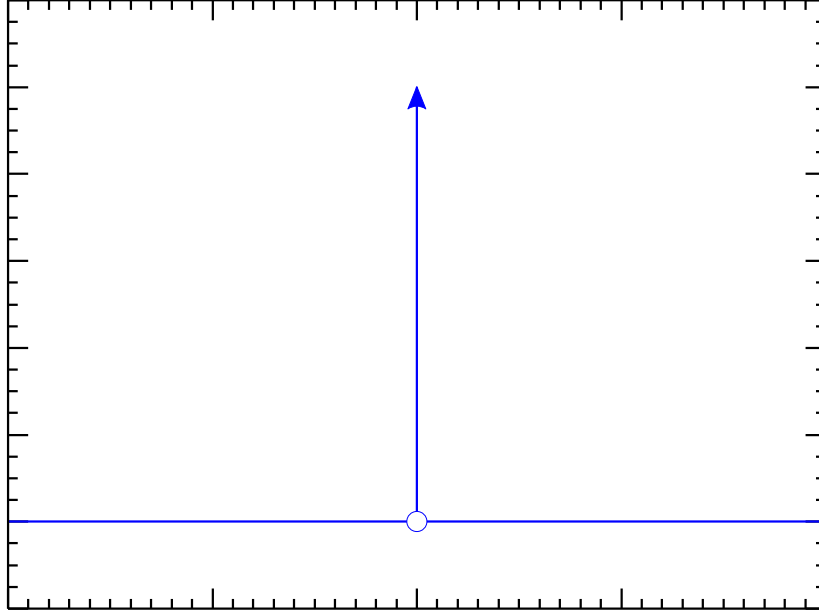


Figure 3: Representation de la fonction delta de Dirac

4.6. Probabilités : La loi de Born

La probabilité de trouver le système dans l'état propre $|E_i\rangle$ est donnée par :

$$P(E = E_i) = |\langle E_i | \psi \rangle|^2$$

où $|E_i\rangle$ est l'état propre de l'observable E avec la valeur propre E_i et ψ est la fonction d'onde du système.

La fonction d'onde ψ peut être écrite comme une somme des états propres de l'observable E , comme suit :

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

où c_i sont les coefficients des états propres.

En substituant ceci à la formule de la probabilité, nous obtenons :

$$P(E = E_i) = |\langle E_i | \sum_i c_i |E_i\rangle|^2 = \sum_i |c_i|^2$$

Ceci montre que la probabilité de trouver le système dans l'état propre $|E_i\rangle$ est égale à la somme des carrés des coefficients des états propres.

4.6.1. Matrice densité et Espérance mathématique

Une matrice densité est une matrice qui décrit l'état quantique d'un système physique. Elle permet de calculer les probabilités des résultats de toute mesure effectuée sur ce système, en utilisant la règle de Born. Il s'agit d'une généralisation des vecteurs d'état ou des fonctions d'onde plus habituels : alors que ceux-ci ne peuvent représenter que des états purs, les matrices de densité peuvent également représenter des états mixtes.

L'espérance mathématique d'un opérateur \hat{A} dans un système quantique décrit par une matrice densité ρ est donnée par la formule suivante :

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{Tr}(\rho \hat{A})$$

où Tr est la fonction trace. La fonction trace d'une matrice est la somme de ses éléments diagonaux.

La fonction trace possède les propriétés suivantes :

- C'est une fonction linéaire.
- Elle est invariante sous les transformations unitaires.
- Elle est définie positive.

La fonction trace peut être utilisée pour calculer la valeur d'espérance de tout opérateur dans un système quantique.

La matrice densité peut être utilisée pour calculer les probabilités des résultats de toute mesure effectuée sur un système quantique. La règle de Born stipule que la probabilité d'obtenir un résultat a lors de la mesure d'une observable \hat{A} est donnée par la formule suivante :

$$P(a) = \frac{\langle a | \rho | a \rangle}{\sum_i \langle i | \rho | i \rangle}$$

où $|a\rangle$ est l'état propre de \hat{A} correspondant au résultat a .

La matrice densité est un outil très important en mécanique quantique. Elle peut être utilisée pour calculer les valeurs d'espérance des opérateurs, les probabilités des résultats des mesures et la fonction d'onde d'un système quantique.

4.7. Opérateurs Hermitien

4.7.1. L'adjoint Hermitien

L'adjoint hermitien d'un ket est un bra. Il est noté A^\dagger . L'adjoint hermitien d'un ket est défini comme suit :

$$\langle A^\dagger \psi | \varphi \rangle = \langle \psi | A \varphi \rangle$$

pour tous les vecteurs ψ et φ dans l'espace vectoriel.

L'adjoint hermitien possède plusieurs propriétés. L'une d'entre elles est qu'il est linéaire. Cela signifie que si A et B sont deux opérateurs, alors

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

Une autre propriété est qu'elle est anti-linéaire. Cela signifie que si A est un opérateur et c un nombre complexe, alors

$$(cA)^\dagger = \bar{c} A^\dagger$$

Enfin, l'adjoint hermitien satisfait la relation suivante :

$$(A^\dagger)^\dagger = A$$

L'adjoint hermitien est un outil très important en mécanique quantique. Il est utilisé pour définir le produit intérieur, qui est une mesure du chevauchement entre deux vecteurs. Le produit intérieur est utilisé pour calculer la valeur d'espérance d'une observable, qui est la valeur moyenne de l'observable sur tous les états possibles du système.

4.7.1.1. L'adjoint d'un Ket et d'un Bra

L'adjoint d'un Ket et d'un bra correspond à $\langle \varphi | \psi \rangle^\dagger = \langle \varphi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \varphi \rangle$ ou $(\langle \varphi | \psi \rangle)^\dagger = | \psi \rangle \langle \varphi |$

D'où $| \psi \rangle^\dagger = \langle \psi |$ et $\langle \varphi |^\dagger = | \varphi \rangle$

4.7.2. Opérateur Hermitien

Un opérateur hermitien est un opérateur qui satisfait cette condition $\hat{E}^\dagger = \hat{E}$

C'est le cas des observables par conséquent $\langle \psi | \hat{E} \varphi \rangle = \langle \hat{E} \psi | \varphi \rangle$

4.8. Opérateur Unitaire

Un opérateur unitaire est un opérateur linéaire U sur un espace de Hilbert H qui satisfait les conditions suivantes :

1. U est inversible.
2. $U^{-1} = U^\dagger$, où U^\dagger est l'adjoint de U .
3. U préserve le produit intérieur de H , c'est-à-dire que pour tous les vecteurs x et y dans H , on a $\langle Ux, Uy \rangle = \langle x, y \rangle$.

Les opérateurs unitaires sont importants en mécanique quantique, car ils représentent des transformations physiques qui préservent le produit intérieur et la probabilité. Par exemple, l'opérateur d'évolution temporelle $U(t)$ pour un système quantique est unitaire et représente l'évolution du système dans le temps.

Les propriétés des opérateurs unitaires peuvent être déduites de leur définition. Par exemple, les valeurs propres d'un opérateur unitaire sont toujours des nombres complexes de module unitaire, et les vecteurs propres d'un opérateur unitaire forment une base orthonormée pour H .

Les opérateurs unitaires conservent les probabilités parce qu'ils préservent le produit intérieur. Le produit intérieur est une mesure du chevauchement entre deux vecteurs, et il est égal à la probabilité que deux vecteurs se retrouvent dans le même état après une mesure. Si un opérateur unitaire préserve le produit intérieur, il préserve également la probabilité.

Voici quelques exemples d'opérateurs unitaires :

- L'opérateur de rotation $R(\theta)$, qui fait pivoter un vecteur d'un angle θ autour de l'origine.
- L'opérateur de réflexion S , qui réfléchit un vecteur à travers l'origine.
- La transformée d'Hadamard H , qui transforme un vecteur en une superposition égale de tous les états de base possibles.
- Les matrices de Pauli σ_x , σ_y , et σ_z , qui sont utilisées pour décrire le spin en mécanique quantique.

4.9. Principe d'incertitude et Commutation

En mécanique quantique, le commutateur de deux opérateurs est une mesure de la manière dont les deux opérateurs peuvent être mesurés simultanément. Le commutateur de deux opérateurs est défini comme $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, où \hat{A} et \hat{B} sont les deux opérateurs. Si le commutateur de deux opérateurs est nul, on dit que les opérateurs sont commutatifs. Les opérateurs commutatifs peuvent être mesurés simultanément, ce qui signifie que les résultats de la mesure d'un opérateur n'affecteront pas les résultats de la mesure de l'autre opérateur.

Si deux observables commutent, ils ont alors une base propre simultanée. Une base propre est un ensemble de vecteurs qui sont des vecteurs propres d'un opérateur donné. Un vecteur propre est un vecteur qui, lorsqu'il est influencé par un opérateur, a une valeur fixe. La base propre simultanée de deux observables commutatives est un ensemble de vecteurs qui sont des vecteurs propres des deux observables.

Le principe d'incertitude stipule qu'il est impossible de connaître à la fois la position et la quantité de mouvement d'une particule avec une précision parfaite. Le principe d'incertitude peut être dérivé du commutateur des opérateurs de position et de quantité de mouvement. Le commutateur des opérateurs de position et de quantité de mouvement est $[x, p] = i\hbar$, où \hbar est la constante de Planck réduite. Cela signifie qu'il est impossible de mesurer simultanément la position et la quantité de mouvement d'une particule avec une précision parfaite.

Le principe d'incertitude peut être exprimé mathématiquement comme suit pour la position et la quantité de mouvement:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

où σ_x est l'incertitude sur la position et σ_p est l'incertitude sur la quantité de mouvement.

Il existe une forme généralisée du principe d'incertitude nommé relations d'incertitude Robertson-Schrödinger:

$$\sigma_A \sigma_B \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|$$

Le principe d'incertitude est un principe fondamental de la mécanique quantique. Il a des implications importantes pour l'interprétation de la mécanique quantique et pour la compréhension du monde physique.

5. Postulats de la mécanique quantique

1. L'état d'un système quantique est entièrement défini par un vecteur d'état dans un espace de Hilbert. Un vecteur d'état est généralement noté $|\psi\rangle$ et appartient à un espace de Hilbert H . Les états quantiques sont des vecteurs unitaires dans H , c'est-à-dire que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.
2. Les observables quantiques sont représentées par des opérateurs hermitiens. Un opérateur hermitien A est un opérateur qui est égal à sa propre adjointe A^\dagger (c'est-à-dire que $A = A^\dagger$ avec \dagger le conjugué soit \star). Les valeurs propres de l'opérateur hermitien A correspondent aux résultats possibles de la mesure de l'observable associée à A .
3. Les résultats de la mesure d'une observable quantique sont des valeurs propres de l'opérateur associé à cette observable. Si l'on mesure une observable quantique représentée par l'opérateur hermitien A sur un état quantique $|\psi\rangle$, la probabilité d'obtenir une valeur propre a est donnée par la formule $P(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2$ où $|a\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre a .
4. La probabilité de mesurer une valeur propre donnée est donnée par le carré du module de l'amplitude de probabilité correspondante. L'amplitude de probabilité pour obtenir une valeur propre a lorsqu'on mesure une observable quantique représentée par l'opérateur hermitien A sur un état quantique $|\psi\rangle$ est donnée par $\langle a|\psi\rangle$. La probabilité $P(a)$ d'obtenir la valeur propre a est alors donnée par

$$P(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2$$

5. L'évolution temporelle d'un système quantique est décrite par l'équation de Schrödinger. L'évolution temporelle d'un état quantique $|\psi(t)\rangle$ est décrite par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

où \hat{H} est l'hamiltonien du système donc l'énergie totale du système et \hbar est $= \frac{h}{2\pi}$.

6. Les états quantiques peuvent être intriqués, ce qui signifie que les propriétés de chaque particule ne peuvent pas être décrites indépendamment des autres particules avec lesquelles elle est intriquée. Par exemple, si deux particules sont intriquées, alors la mesure de l'une des particules affectera instantanément l'état de l'autre particule, peu importe la distance qui les sépare.

5.1. Equation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger dépendante du temps peut être obtenue à partir de l'équation de Schrödinger indépendante en suivant les étapes suivantes :

1. Supposons que la fonction d'onde $\Psi(t, r)$ puisse être écrite comme un produit d'un facteur dépendant du temps et d'un facteur dépendant de l'espace :

$$\Psi(t, r) = \psi(t)\varphi(r)$$

2. Substituer ceci dans l'équation de Schrödinger indépendante et multiplier les deux côtés par $\psi(t)^*$:

$$-\frac{i\hbar}{2m}\psi'(t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\Delta\varphi(r) + V(r)\varphi(r))\psi(t)^*$$

3. Simplifier le côté gauche en combinant les termes :

$$-\frac{i\hbar}{2m}\psi'(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(t) + V(r)\psi(t)^*$$

4. Intégrer les deux côtés par rapport au temps :

$$\psi(t) = \psi(0) + \frac{i\hbar}{2m} \int_0^t \Delta\psi(s)ds - \frac{i\hbar}{2m} \int_0^t V(r)\psi(s)^*ds$$

5. Le premier terme du côté droit est la fonction d'onde initiale, que l'on suppose connue. Le second terme du côté droit est une fonction de l'espace et du temps, et il peut être trouvé en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$\Delta\psi(s) + V(r)\psi(s) = 0$$

L'équation de Schrödinger dépendante du temps peut alors être écrite comme suit :

$$i\hbar \frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = H\psi(t)$$

où H est l'opérateur hamiltonien.

L'équation de Schrödinger dépendante du temps est une équation linéaire qui peut être résolue en utilisant le principe de superposition. Le principe de superposition stipule que toute solution à l'équation de Schrödinger indépendante du temps peut être additionnée pour former une autre solution à l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

La densité de probabilité est définie comme $|\psi|^2$, et c'est une mesure de la probabilité de trouver la particule en un point donné de l'espace. La probabilité totale doit toujours être égale à 1, ce qui signifie que la fonction d'onde doit être normalisée.

La constante de Planck donne les unités de l'opérateur hamiltonien. L'opérateur hamiltonien est le générateur de translations temporelles, et l'énergie est la quantité conservée sous l'effet des translations temporelles.

5.1.1. Exemple d'un puits de potentiel fini

L'équation de Schrödinger pour une particule dans un puits de potentiel fini est la suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

où $V(x)$ est l'énergie potentielle de la particule, E est l'énergie de la particule, $\psi(x)$ est la fonction d'onde de la particule, et \hbar est la constante de Planck réduite.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger, on peut utiliser la méthode de séparation des variables. Cette méthode consiste à supposer que la fonction d'onde peut être séparée en deux parties :

$$\psi(x) = X(x)Y(y)Z(z)$$

où $X(x)$ est une fonction de x , $Y(y)$ est une fonction de y , et $Z(z)$ est une fonction de z . En substituant ceci à l'équation de Schrödinger, nous obtenons :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2X(x) + V(x)X(x) = EX(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 Y(y) + EY(y)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 Z(z) + EZ(z)$$

La première équation peut être résolue pour $X(x)$, la deuxième pour $Y(y)$ et la troisième pour $Z(z)$. Les solutions de ces équations sont appelées fonctions propres, et les valeurs propres correspondantes sont les niveaux d'énergie de la particule.

Dans le cas d'une particule dans un puits de potentiel fini, l'énergie potentielle est nulle à l'intérieur du puits et infinie à l'extérieur. Cela signifie que les fonctions propres doivent être nulles à l'extérieur du puits. Les solutions de l'équation de Schrödinger dans ce cas sont appelées ondes stationnaires et sont données par :

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

où a est la largeur du puits et n est un entier. Les niveaux d'énergie de la particule sont donnés par :

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

Les ondes stationnaires représentent les états possibles de la particule dans le puits. La particule ne peut exister que dans ces états, et elle ne peut avoir d'autre énergie que les niveaux d'énergie donnés par l'équation de Schrödinger.

5.1.2. Exemple sur un oscillateur harmonique

L'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique est la suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \psi(x) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x)$$

où m est la masse de l'oscillateur, ω est la fréquence angulaire, et E est l'énergie de l'oscillateur.

Pour résoudre cette équation, on peut utiliser la méthode de séparation des variables. Cette méthode consiste à supposer que la fonction d'onde peut être séparée en deux parties :

$$\psi(x) = X(x)Y(y)Z(z)$$

où $X(x)$ est une fonction de x , $Y(y)$ est une fonction de y , et $Z(z)$ est une fonction de z . En substituant ceci à l'équation de Schrödinger, nous obtenons :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 X(x) = EX(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 Y(y)}{dy^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 Z(z)}{dz^2} + 0 = EZ(z)$$

La première équation peut être résolue pour $X(x)$, la deuxième pour $Y(y)$ et la troisième pour $Z(z)$. Les solutions de ces équations sont appelées fonctions propres, et les valeurs propres correspondantes sont les niveaux d'énergie de l'oscillateur.

Les fonctions propres de l'oscillateur harmonique sont appelées polynômes d'Hermite et sont données par :

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sqrt{\frac{2\omega}{\pi \hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}} x\right)$$

où H_n est le n ème polynôme d'Hermite. Les niveaux d'énergie de l'oscillateur sont donnés par :

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Les polynômes d'Hermite représentent les états possibles de l'oscillateur. L'oscillateur ne peut exister que dans ces états, et il ne peut avoir d'autre énergie que les niveaux d'énergie donnés par l'équation de Schrödinger.

5.2. Moment quantique

L'opérateur de quantité de mouvement est noté \hat{P} , et la fonction d'onde d'une particule est notée ψ . L'opérateur de quantité de mouvement agit sur la fonction d'onde comme suit :

$$\hat{P}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

où \hbar est la constante de Planck réduite.

L'opérateur de quantité de mouvement peut être utilisé pour calculer la quantité de mouvement d'une particule. La quantité de mouvement d'une particule est donnée par la formule suivante :

$$p = \langle \psi | \hat{P} \psi \rangle$$

où $\langle \psi | \hat{P} \psi \rangle$ est la valeur d'espérance de l'opérateur de quantité de mouvement.

6. Effet Tunnel

L'effet tunnel quantique est un phénomène dans lequel un objet tel qu'un électron ou un atome traverse une barrière d'énergie potentielle que, selon la mécanique classique, l'objet n'a pas suffisamment d'énergie pour franchir.

L'effet tunnel est une conséquence de la nature ondulatoire de la matière, où la fonction d'onde quantique décrit l'état d'une particule ou d'un autre système physique, et où les équations d'onde telles que l'équation de Schrödinger décrivent leur comportement.

L'équation de Schrödinger peut être résolue pour trouver la fonction d'onde d'une particule dans une barrière d'énergie potentielle. La fonction d'onde pourra avoir une valeur non nulle de l'autre côté de la barrière, même si la particule n'a pas assez d'énergie pour atteindre ce côté selon la mécanique classique.

La probabilité d'un effet tunnel est proportionnelle au carré de la fonction d'onde. Cela signifie que les particules ayant une fonction d'onde plus grande auront plus de chances de traverser une barrière que les particules ayant une fonction d'onde plus petite.

7. Spin

Le spin est une forme intrinsèque de moment angulaire porté par les particules élémentaires. Il s'agit d'une propriété quantifiée exprimée par un nombre quantique de spin, noté « s ». Par exemple, les électrons ont un spin 1/2, ce qui signifie qu'ils ont deux états de spin possibles. Le spin d'une particule détermine un grand nombre de ses propriétés, comme son moment magnétique et son comportement statistique. Le spin est une propriété fondamentale des particules, comme la masse et la charge, et il ne peut pas être expliqué par d'autres propriétés.

Une conséquence importante du spin des particules est le couplage spin-orbite, qui résulte de l'interaction entre le spin d'une particule et son mouvement dans un champ magnétique. Le couplage spin-orbite peut provoquer la division des niveaux d'énergie dans les atomes, ce qui affecte les propriétés des électrons et peut conduire à des phénomènes tels que la structure fine des lignes spectrales.

Le spin d'une particule la fait agir comme un petit aimant. Cela signifie que les particules peuvent interagir par l'intermédiaire de la force magnétique et que l'interaction du moment magnétique de spin entraîne également l'alignement des particules dans les champs magnétiques. Les propriétés magnétiques d'une particule sont déterminées par son spin, qui détermine l'intensité et la direction de son moment magnétique. Le moment magnétique μ d'une particule est proportionnel à son moment angulaire de spin :

$$\mu = g * \left(\frac{e}{2}m\right) * S$$

où g est le facteur g , e est la charge élémentaire et m est la masse de la particule.

La direction du spin d'une particule peut être décrite par son vecteur spin, qui est une quantité vectorielle pointant dans la direction du moment angulaire de spin de la particule. L'ampleur du moment angulaire de spin peut être calculée à l'aide de la formule suivante :

$$|S| = \sqrt{s(s+1)} * \hbar$$

où \hbar (h-bar) est la constante de Planck réduite.

Le moment angulaire du spin a des composantes quantifiées le long d'un axe donné (généralement l'axe z). La composante le long de l'axe z , notée S_z , peut prendre des valeurs discrètes données par :

$$S_z = m_s * \hbar$$

où m_s est le nombre quantique magnétique, qui varie de $-s$ à s par pas entiers. Par exemple, un électron, qui est un fermion de spin $1/2$, peut avoir deux valeurs possibles pour S_z : $+\frac{\hbar}{2}$ et $-\frac{\hbar}{2}$, correspondant respectivement à $m_s = +\frac{1}{2}$ et $m_s = -\frac{1}{2}$.

La rotation du vecteur spin sous l'effet des rotations de la particule est décrite par l'opérateur de moment angulaire de spin, noté S . L'algèbre de spin régit les relations de commutation entre les composantes du vecteur spin :

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, [S_y, S_z] = i\hbar S_x, [S_z, S_x] = i\hbar S_y$$

Les valeurs propres de S_z sont $m_s = s, s-1, \dots, -s$, ce qui signifie que la projection du spin est quantifiée le long de l'axe z . Cette quantification a des implications pour le comportement des particules dans les champs magnétiques, ainsi que pour la distribution des particules dans les systèmes. Cette quantification a des implications sur le comportement des particules dans les champs magnétiques, ainsi que sur la distribution des particules dans les systèmes.

La force du couplage spin-orbite est proportionnelle au numéro atomique du noyau et au spin électronique, et joue un rôle important dans des phénomènes tels que la division de la structure fine dans les spectres atomiques et l'effet Hall de spin dans les systèmes à l'état solide.

La direction du moment angulaire du spin est déterminée par la direction du moment magnétique. Le moment magnétique d'une particule est une quantité vectorielle qui pointe dans la direction du moment angulaire de spin. L'orientation du moment magnétique est affectée par les champs magnétiques externes et peut entraîner la précession du moment angulaire du spin autour de la direction du champ magnétique, un phénomène connu sous le nom de précession de Larmor.

Le comportement du spin sous l'effet des rotations est régi par les transformations de Lorentz, qui relient les coordonnées d'un événement mesurées par des observateurs situés dans des cadres de référence inertiels différents. Sous l'effet d'une transformation de Lorentz, les composantes du spin le long de différentes directions se mélangent, ce qui conduit au phénomène de couplage spin-orbite.

Le principe d'exclusion de Pauli stipule que deux fermions ne peuvent pas occuper simultanément le même état quantique, ce qui inclut l'état de spin.