



Introduction à la mécanique quantique

Gilles NGUYEN VIEN

Brest, le 7 janvier 2026

Bibliographie

Mécanique Quantique

Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë
Hermann éditeurs des Sciences et des Arts

Mécanique Quantique

Richard Feynman
InterEditions

Quantique – Rudiments

Jean Marc Lévy-Leblond, Françoise Balibar
Masson

Physique Quantique 2^e édition

Michel Le Bellac
EDP Sciences
CNRS Éditions

Notes de Cours

Jacques Langlois

Table des matières

I	ORIGINE DE LA MECANIQUE QUANTIQUE	11
II	RAPPEL COMPORTEMENT ONDULATOIRE CLASSIQUE	13
II.1	GENERALITES SUR LES ONDES	13
II.1.1	<i>Onde plane</i>	13
II.1.2	<i>Onde sphérique</i>	17
II.2	PRINCIPE DE SUPERPOSITION.....	17
II.3	ENERGIE TRANSPORTEE PAR UNE ONDE	18
II.4	INTERFERENCES.....	19
II.5	L'EXPERIENCE DE YOUNG	20
II.6	ANNEXE : LA COHERENCE.....	23
II.7	ANNEXE : LE PRINCIPE DE HUYGUENS-FRESNEL.....	25
III	LA LUMIERE.....	III-27
III.1	LA LUMIERE MISE EN LUMIERE	III-27
III.2	OPTIQUE GEOMETRIQUE ET SA LIMITE DE VALIDITE	III-28
III.3	THEORIE ONDULATOIRE DE LA LUMIERE	III-30
III.4	LA THEORIE ONDULATOIRE ET LA FORMATION DES IMAGES	III-32
III.5	LA POLARISATION DE LA LUMIERE	III-32
III.6	LE RAYONNEMENT DU CORPS NOIR	III-35
III.7	LA MATIERE COMME SOURCE DE LUMIERE	III-38
III.7.1	<i>De Thomson à Rutherofrd</i>	III-38
III.7.2	<i>Le modèle de Bohr</i>	III-40
IV	LES FONDEMENTS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE	IV-44
IV.1	EVIDENCE EXPERIMENTALE DE L'INCOMPATIBILITE DE CERTAINES GRANDEURS.....	IV-44
IV.2	DUALITE ONDE-CORPUSCULE	IV-45
IV.3	ANNEXE : DUALITE ONDE-CORPUSCULE.....	IV-45
IV.4	VERIFICATIONS EXPERIMENTALES.....	IV-48
IV.4.1	<i>Diffraction des électrons</i>	IV-48
IV.4.2	<i>Propriétés ondulatoires de la matière : autres aspects</i>	IV-49
IV.5	NOTIONS DE PAQUETS D'ONDE	IV-49
IV.6	MESURES DE LA POSITION ET L'IMPULSION	IV-53
IV.7	INTERPRETATION DES INEGALITES DE HEISENBERG	IV-56
IV.7.1	<i>Effet tunnel</i>	IV-57
IV.8	- LIMITE DE VALIDITE DE LA PHYSIQUE CLASSIQUE.....	IV-58
V	PROBABILITES ET AMPLITUDES QUANTIQUES	60
V.1	INTRODUCTION.....	60
V.2	LA NOTION DE PROBABILITE EN PHYSIQUE QUANTIQUE	60
V.2.1	<i>Loi de Malus</i>	60
V.2.2	<i>Réflexion partielle de la lumière</i>	61
V.2.3	<i>Nature granulaire de la lumière</i>	62
V.3	LE COMPORTEMENT QUANTIQUE.....	63
V.4	NOTION D'AMPLITUDES DE PROBABILITE POUR CARACTERISER L'EVOLUTION SPATIO-TEMPORELLE D'UN SYSTEME.....	66
V.5	CALCUL DES AMPLITUDES ET DES PROBABILITES	67
V.5.1	<i>Principe d'addition des probabilités</i>	68
V.5.2	<i>Principe de factorisation séquentielle</i>	68
V.6	PROPAGATION RECTILIGNE DE LA LUMIERE.....	68
VI	ETATS QUANTIQUES	72
VI.1	NOTION D'ETATS QUANTIQUES.....	72
VI.2	ESPACE DES ETATS	72
VI.2.1	<i>Notation</i>	72
VI.2.2	<i>Produit scalaire hermitien</i>	73
VI.3	ESPACE DUAL.....	73

VI.3.1	Définition.....	73
VI.3.2	Notation bra	73
VI.3.3	Correspondance entre kets et bras	73
VI.4	OPERATEURS LINEAIRES	74
VI.4.1	Linéarité.....	74
VI.4.2	Adjoint d'un opérateur	74
VI.4.3	Opérateur hermitique.....	75
VI.4.4	Opérateur unitaire.....	75
VI.4.5	Transformation d'un opérateur	76
VI.4.6	Elément de matrice d'un opérateur	76
VI.5	VECTEURS PROPRES ET VALEURS PROPRES	VI-76
VI.6	BASES DE L'ESPACE DES ETATS.....	VI-77
VI.7	REPRESENTATION MATRICIELLE.....	VI-79
VI.8	AMPLITUDES DE LOCALISATION.....	VI-81
VI.9	POSTULATS DE LA THEORIE QUANTIQUES	VI-82
VI.10	MESURE DE DEUX GRANDEURS PHYSIQUES.....	VI-82
VII	OPERATEUR D'EVOLUTION ET EQUATION DE SCHRÖDINGER.....	VII-85
VII.1	EQUATION DE SCHRÖDINGER DANS UNE BASE DONNEE	VII-86
VII.2	ETATS STATIONNAIRES	VII-86
VII.3	RECHERCHE SYSTEMATIQUE DES ETATS STATIONNAIRES	VII-87
VII.4	CONSTANTES DU MOUVEMENT	VII-89
VII.5	EXEMPLE : SYSTEME A DEUX ETATS.....	VII-90
VII.5.1	L'ion moléculaire H_2^+	VII-90

Table des figures

Figure 1 – Train d'ondes.....	23
Figure 2 – Principe de Huyghens-Fresnel dans un milieu homogène et un milieu inhomogène	26
Figure 3 – Spectre des ondes électromagnétique.....	III-27
Figure 4 - Formation d'une image par une lentille	III-29
Figure 5 - Champ d'induction magnétique et électrique du rayonnement.....	III-31
Figure 6 - Ondes sphériques et planes	III-31
Figure 7 - Ondes et lentille.....	III-32
Figure 8 - Polarisation elliptique.....	III-33
Figure 9 - Polarisation circulaire gauche.....	III-34
Figure 10 - corps noir idéalisé.....	III-36
Figure 11 - Distribution spectrale du corps noir (ordonnée : émittance en unité arbitraire) .. III-37	
Figure 12 –Expérience de Rutherford	III-39
Figure 13 -Rayonnement de l'électron sur l'orbite de Rutherford	III-39
Figure 14 - Diffraction des électrons par une fente	IV-44
Figure 15 - Expérience de Davisson et Germer	IV-48
Figure 16	IV-51
Figure 17 - Principe du microscope d'Heisenberg.....	IV-55
Figure 18 - Effet tunnel	IV-58
Figure 19 – Champs électriques	60
Figure 20 - Photographies	63
Figure 21 - Franges d'Young	63
Figure 22 - Dispositif d'Young avec corpuscules matériels	64
Figure 23 - Ondes classiques	64
Figure 24 - Eclairage des fentes	65
Figure 25 - - Représentation des amplitudes dans le plan complexe	67
Figure 26 - Trajet rectiligne de la lumière.....	69
Figure 27 - PSAP.....	69

Index

- Absorption, III-35
Aire de cohérence, 20
Amplitude de localisation, VI-81
Amplitude de probabilité, 60
Amplitude de probabilité de transition, 66
Amplitude d'états, VI-78
Célérité, 13, 15
Cohérence, 19, 23
Cohérence spatiale, 19, 25
Cohérence temporelle, 19, 25
Commutateur, VI-83
Constante de Planck, III-38
Constante du mouvement, VII-90
Corps noir, III-35
Différence de marche, 22
Diffraction, IV-44
Diffusion, III-35
Dispersif, 16
Effet Compton, III-27
Effet photo électrique, III-27
Effet tunnel, IV-57
Emission, III-35
Emission spontanée, 20, 23
Equation aux valeurs propres, VII-88
Espace des états, 72
Espace dual, 73
Etat lié, VI-81
Etat quantique, 72
Etats stationnaires, VII-87
Expérience des fentes d'Young, 20
Facteur de phase, 67
Fonction d'onde, VI-81
Fonction d'onde de carré sommable, VI-81
Fréquence, 15
Front d'onde, 14
Grandeurs physiques compatibles, VI-84
Hermitique, 75
Indice du milieu, 16
Inégalité d'Heisenberg, IV-56
Isotrope, 13
Loi du déplacement de Wien, III-37
Longueur de cohérence, 20
Longueur d'onde, 14
Microscope de Heisenberg, IV-53
Milieu non dispersif, 16
Milieu non dissipatif, 18
Nombre d'onde, 16
Observable, VI-79
observer effect, IV-56
Onde longitudinale, 13
Onde plane, 14
Onde sphérique, 17
Onde transversale, 13
Ondes linéaires, 17
Opérateur hamiltonien, VII-85
Paquet d'ondes, IV-50
Période, 15
Périodicité, 13
Photons, III-38
Plan de polarisation, 13
Polarisation rectiligne, III-34
Polariseur, III-35
Principe de Fermat, III-28
Principe de superposition, 17
Principe de superposition des amplitudes, 66
Propagation, 13
Pulsation, 14
Quanta selon Planck, III-37
Quantons, IV-49
Quantum, 12
Rayon lumineux, III-28
Rayonnement du corps noir, III-27
Réflexion, III-35
Relation de dispersion, 16
Relation de fermeture, VI-79
scintillation, III-38
Série de Fourier, 17
Sources synchrones, 18
Superposition linéaire d'états, VI-77
Surface d'onde, 14
Temps de cohérence, 19
Temps de réponse, 19
Train d'onde, 23
Trains d'onde, 20
Transformée de Fourier, 17
Vecteur bra, 73
Vecteur ket, 72
Vibration, 13
Vitesse de groupe, IV-53
Vitesse de phase, 15

I ORIGINE DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

A la fin du 19^{ème} siècle, la physique dite classique formait un tout cohérent qui suffisait à expliquer la plupart des phénomènes physiques observés notamment de l'échelle macroscopique à l'échelle céleste. Les lois de Newton¹ régissent le mouvement des corps tandis que le rayonnement est décrit par la théorie de Maxwell de l'électromagnétisme (dès 1865) intégrant la notion de champs introduite par Faraday. La thermodynamique formalisée par Clausius (1850) puis la physique statistique introduite par la théorie cinétique des gaz de Maxwell² et Boltzmann³ explique le comportement et l'évolution de systèmes physiques composés d'un très grand nombre de particules.

L'idée selon laquelle la matière est composée de constituants premiers de très petite taille appelés atome (*a* exprime la négation en grec et *tomos* sécable) au regard de la matière à son échelle macroscopique remonte à l'antiquité grecque (Démocrite⁴). Cependant cette hypothèse n'avait aucun fondement expérimental et correspondait à une manière conceptuelle d'appréhender la matière en constituants premiers. L'hypothèse atomique chemine du 18^{ème} au 19^{ème} siècle notamment par les travaux de la chimie pour être confortée par la théorie cinétique des gaz dans laquelle des grandeurs physiques macroscopiques en nombre limité telles que la pression, la température et le volume sont le reflet des caractéristiques des mouvements chaotiques des particules individualisées (atomes, molécules) qui composent le gaz. Ces particules étaient trop petites pour être vues. **C'est bien les grands nombres (chocs par seconde) relatifs à ces particules qui produisent des effets macroscopiques mesurables tout en masquant le caractère fondamental individuel d'une particule constituant le gaz.**

Malgré la conviction de l'existence des atomes, il a fallu attendre le début du 20^{ème} siècle pour voir publier les premières propositions de modèle d'atomes par Joseph John Thomson⁵ (découverte de l'électron en 1897 et prix Nobel en 1906) Jean Perrin⁶ (modèle planétaire de l'atome et prix Nobel en 1926).

A la fin du 19^{ème} siècle, l'étude des échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement produit l'hypothèse de la quantification des échanges d'énergie produit par Planck en 1900.

Les travaux d'Einstein (quantification de l'énergie électromagnétique et prix Nobel en 1921) notamment sur l'effet photoélectrique, de Niels Bohr (quantification de Bohr et prix Nobel en 1922) puis de Louis de Broglie (longueur d'onde de la matière et prix Nobel en 1929), d'Erwin Schrödinger (équation d'évolution temporelle et prix Nobel en 1933), de Wolfgang Pauli (principe d'exclusion de Pauli et prix Nobel en 1945) et de Max Born (interprétation probabiliste du module au carré de la fonction d'onde et prix Nobel en 1954) établirent les bases d'une

¹ Isaac Newton (1643-1727) : philosophe, mathématicien, physicien et astronome connu pour ses travaux relatant tous les fondements principaux de la mécanique classique : égalité de l'action et de la réaction, principe d'inertie, et surtout loi de gravitation universelle.

² James Clerk Maxwell (1831-1879) : physicien écossais né à Edimbourg connu pour l'édification de l'électromagnétisme. Il fut un pionnier de la Théorie cinétique des gaz.

³ Ludwig Boltzmann (1844-1906) : physicien autrichien né à Vienne précurseur de la physique moderne. Il est le père fondateur de la physique statistique. On lui doit le principe de l'irréversibilité du monde réel et sa formulation en termes d'entropie et de second principe.

⁴ Démocrite (460-370 av JC) : philosophe grec né à Abdère.

⁵ Joseph John Thomson (1856-1940) : physicien anglais à l'origine de la découverte de l'électron (1897), des isotopes et de la spectrométrie de masse. Il reçoit le prix Nobel de Physique en 1906 pour ses travaux sur la conductivité électrique dans les gaz.

⁶ Jean Baptiste Perrin (1870-1942) a reçu le prix Nobel en 1926 pour ses travaux sur le mouvement brownien (étude du mouvement désordonné du grosse particule dont le diamètre est de l'ordre du micron immergé dans un fluide révélant l'agitation moléculaire régnant dans un fluide) conduisant à la première détermination précise du nombre d'Avogadro N_A .

théorie nouvelle connue aujourd'hui sous le nom de **mécanique quantique** (ou physique quantique).

L'échelle des expériences et phénomènes décrit par la physique quantique est celle de l'atome, de la molécule ou plus petit (échelle sub-atomique). La matière étant constituée d'atomes, toute la physique fondamentale découle plus ou moins directement des concepts fondamentaux de la physique quantique.

Le terme **quantique** se dit de ce qui se rapporte aux quanta⁷ pluriel du mot quantum exprimant à la fois une quantité déterminée et également la plus petite quantité physique susceptible d'être échangée.

Il est parfois tentant d'assimiler la théorie classique à l'étude des objets de l'infiniment grand à l'échelle macroscopique et de limiter la nécessité de la théorie quantique à l'étude de phénomènes "exotiques" ayant lieu à l'échelle microscopique. Cette idée abusivement simplificatrice irait à l'encontre de ce qu'est la place de la physique quantique dans notre monde moderne aussi bien au travers d'objets et de technologies courantes (lasers, transistors, supraconducteur) qu'au travers d'instruments de diagnostic et d'investigation modernes (RMN⁸, RPE⁹, IRM¹⁰, microscope à effet Tunnel pour ne citer que les plus connus).

⁷ pluriel du mot quantum

⁸ Résonance magnétique nucléaire.

⁹ Résonance Paramagnétique électronique.

¹⁰ Imagerie par résonance magnétique.

II RAPPEL COMPORTEMENT ONDULATOIRE CLASSIQUE

Avant d'aborder la lumière, il est utile pour la suite de présenter brièvement des généralités sur les ondes classiques.

II.1 Généralités sur les ondes

Une onde est une vibration se propageant de proche en proche. La grandeur qui vibre peut être de différentes natures :

- une pression,
- une déformation,
- un champ électrique,
- un champ magnétique...

Les ondes ont besoin d'un support matériel (gaz, solide, liquide) hormis les ondes électromagnétiques. Ces dernières peuvent se propager dans le vide. La lumière, les ondes "radios", les rayons X sont des ondes électromagnétiques, qui comme leur nom l'indique, sont formées par la combinaison de deux champs oscillants l'un électrique et l'autre magnétique. Lorsque ces ondes se propagent dans un milieu, elles perturbent l'ordonnement des charges électriques élémentaires (électrons, noyaux...).

La **vibration** est caractérisée par une direction portée par \vec{u} , une amplitude a et une pulsation ω imposée par la source.

Un point M de l'espace (ou du milieu) sera le siège d'une modification temporaire de même nature que celle provoquée au point source S mais avec un certain retard θ dans le temps. Si d sépare S de M , ce retard est tel que :

$$\theta = \frac{d}{c}$$

La **propagation** est caractérisée par la vitesse \vec{c} de l'onde dont la norme c , appelée célérité, dépend du milieu traversé. La célérité est constante pour une onde donnée et pour un milieu homogène donné. Si le milieu est **isotrope**, la célérité est la même dans toutes les directions issues de S . A titre d'exemple, la propagation d'une onde sinusoïdale dans une direction donnée se traduit par une translation de la sinusoïde à la vitesse qui est précisément la célérité.

Une **onde longitudinale** est telle que la vibration et la propagation ont la même direction. A titre d'exemple, citons les ondes acoustiques dans les gaz ainsi que les ondes de pression dans les liquides et les solides.

Une **onde transversale** est telle que les directions de vibration et de propagation sont perpendiculaires. La corde vibrante, les ondes de déformations dans les solides et les ondes électromagnétiques dans le vide illustrent ce type d'onde.

Hormis pour les ondes longitudinales, les directions de propagation et de vibrations définissent un plan appelé **plan de polarisation**.

II.1.1 Onde plane

Une onde monochromatique (1 seule fréquence) est l'onde progressive périodique la plus simple. Elle possède par définition une double périodicité spatiale et temporelle. Une sinusoïde possédant de telles propriétés, on peut représenter une vibration monochromatique sous la forme :

$$(1) \quad f(\vec{r}, t) = a \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$$

où a est l'amplitude maximum de vibration, \vec{k} le vecteur d'onde, \vec{r} le vecteur position où la vibration est observée et ω la pulsation. $(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$ la phase de l'onde.

L'ensemble des points de l'espace pour lesquels la phase est constante à un instant donné forme une **surface d'onde** ou **front d'onde**. On peut déterminer une surface d'onde en cherchant l'ensemble des points M pour lesquels $\vec{k} \cdot \vec{r}$ a une valeur constante à t donné.

Prenons un point M_1 de l'espace dont la position est telle que :

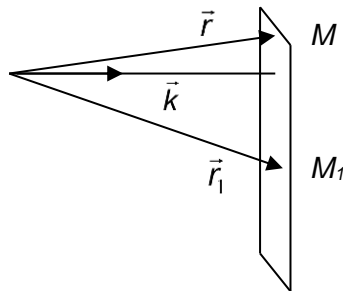
$$\vec{k} \cdot \vec{r}_1 = \vec{k} \cdot \overrightarrow{OM_1}$$

$$\vec{k} \cdot \vec{r}_1 = \vec{k} \cdot (\overrightarrow{OM} + \overrightarrow{MM_1}) = \vec{k} \cdot \overrightarrow{OM} + \vec{k} \cdot \overrightarrow{MM_1}$$

Si on impose M_1 de telle manière que la phase soit la même que pour le point M , on obtient :

$$(2) \quad \vec{k} \cdot \overrightarrow{MM_1} = 0$$

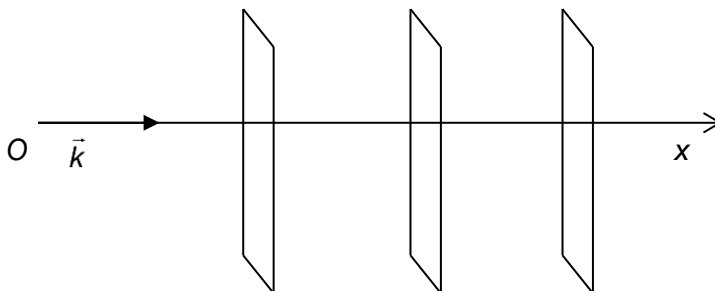
Les points M et M_1 empiétant la condition (2) se trouvent dans un plan perpendiculaire à \vec{k} .



Si on fait coïncider l'axe Ox avec la direction de \vec{k} , on a $k_y = k_z = 0$ et $k_x = k$. La fonction 0 s'écrit alors :

$$(3) \quad f(x, t) = a \cos(kx - \omega t)$$

et les surfaces d'onde sont les plans perpendiculaires à Ox :



Les relations 0 et (3) définissent une **onde plane**.

La plus petite distance λ telle que :

$$f(x + \lambda, t) = f(x, t)$$

à chaque instant s'appelle la **longueur d'onde**. C'est donc la distance entre deux fronts d'onde successifs de même phase. La condition 0 est satisfaite si le remplacement de x par $x + \lambda$ conduit à un changement de phase de 2π .

A partir de (3), on trouve :

$$(4) \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}$$

Le plus petit intervalle de temps T telle que :

$$(5) \quad f(x, t + T) = f(x, t)$$

en chaque point de l'espace s'appelle la **période**. La période est bien le temps au bout duquel l'état de vibration se reproduit identiquement en un point de l'espace. La condition (5) est satisfaite si le remplacement de t par $t + T$ conduit à un changement de phase de -2π .

A partir de (3), on trouve :

$$T = \frac{2\pi}{\omega}$$

Ainsi, (3) conduit à :

$$f(x, t) = a \cos\left(2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right)$$

La fréquence est le nombre de fois par seconde qu'en un point donné de l'espace, l'état de vibration se reproduit identiquement. C'est donc la valeur inverse de la période :

$$(6) \quad \nu = \frac{1}{T}$$

Si d'autre part, l'observateur photographie à un instant donné l'onde, il observera que les propriétés du milieu varient de manière sinusoïdale en fonction de la position. Cela met en évidence la périodicité spatiale qu'est la longueur d'onde λ . C'est donc la distance entre deux fronts d'onde successifs de même phase.

Au fur et à mesure que le temps s'écoule, la phase de l'onde varie en un point donné de l'espace. Si un observateur voulait se trouver à chaque instant en un point tel que la phase soit constante (sur une crête par exemple), il devrait se déplacer à une vitesse qui est par définition la **vitesse de phase** de l'onde.

Pour obtenir la vitesse de phase ou célérité, il suffit de mesurer la distance élémentaire dx séparant deux points de l'espace présentant la même phase et le temps nécessaire dt pris par l'onde pour parcourir cette distance. La phase étant constante, cela revient à affirmer que la différentielle de la phase est nulle soit :

$$d(kx - \omega t) = 0$$

soit

$$kdx - \omega dt = 0$$

d'où :

$$(7) \quad \frac{dx}{dt} = \frac{\omega}{k} = v_\varphi$$

Ce résultat signifie que l'onde se déplace dans le sens positif de l'axe Ox .

La fonction :

$$(8) \quad f(x, t) = a \cos(kx + \omega t)$$

représente donc une onde se déplaçant dans le sens négatif de l'axe Ox à une vitesse :

$$v_\varphi = -\frac{\omega}{k}$$

Cette relation donnant la vitesse de phase reste la même quel que soit le milieu pour l'onde monochromatique (3).

Si l'observateur avait pris deux clichés à des instants très rapprochés, il verrait que la sinusoïde s'est déplacée à la vitesse de phase.

Une onde monochromatique (3) est donc caractérisée par une pulsation ω et par un nombre k module du vecteur d'onde que l'on nomme nombre d'onde. D'après la relation (4), k est le nombre de longueurs d'onde contenues dans une distance de 2π (période de la fonction sinusoïdale). Son unité est le radian par mètre et sa dimension l'inverse d'une longueur (L^{-1}).

La pulsation ω et le nombre d'onde k sont liés par une relation appelée **relation de dispersion**. Cette relation **est propre à la nature précise de l'onde et au milieu traversé**.

Pour des ondes électromagnétiques (OEM) traversant le vide, il sera démontré (en électromagnétisme) à partir de l'équation de propagation que la relation de dispersion est :

$$(9) \quad \omega = ck$$

où c est la vitesse de phase de l'onde dans le vide connue sous le nom de vitesse de la lumière (dans le vide) $c \approx 3 \cdot 10^8$ m/s.

La relation de dispersion (9) indique que la pulsation est une fonction linéaire du nombre d'onde.

D'après (7), la vitesse de phase est donnée par $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$, on montre que la vitesse de phase ne dépend pas de la pulsation pour les OEM. On dit alors que le milieu est **non dispersif**.

Le vide n'est donc pas un milieu dispersif, la vitesse de la lumière ne dépendant pas de la couleur. De même l'air ambiant peut être assimilé à un milieu non dispersif pour les ondes acoustiques (la note de la contrebasse parvient à l'auditeur en même temps que le coup de cymbale pour peu que les instruments aient été sollicités au même instant).

Dans un milieu transparent, la vitesse de phase des ondes électromagnétiques est diminuée d'une quantité quantifiée par l'indice de réfraction du milieu dont on peut montrer qu'il dépend de la pulsation :

$$n(\omega) = \frac{c}{v_\varphi}$$

Un milieu est dit **dispersif** si l'indice du milieu dépend de la pulsation de l'onde.

Le verre est un milieu dispersif dont l'indice augmente lorsque la longueur d'onde diminue. Cette conséquence est une réfraction différente pour des longueurs d'onde différentes (prisme).

Pour les vagues en eau profonde, la relation de dispersion est donnée par :

$$\omega = \sqrt{gk}$$

ce qui conduit à une vitesse de phase dépendant du nombre d'onde :

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \sqrt{\frac{g}{k}}$$

Le milieu est dispersif.

Une onde qui résulte de la somme d'ondes monochromatiques de pulsation et de longueurs d'onde différentes se propagera dans un milieu dispersif avec une déformation puisque les composantes monochromatiques se dispersent.

Plus généralement, tout phénomène **périodique continu non sinusoïdal** peut être représenté par une somme discrète de fonctions sinusoïdales (série de Fourier). En outre, toute fonction continue peut se décomposer en une somme continue (intégrale) de fonctions sinusoïdales (transformée de Fourier).

Dans certaines applications, il est commode d'utiliser la représentation complexe de l'onde :

$$(10) \quad f(x, t) = a \cos(kx - \omega t + \varphi)$$

(les propriétés des fonctions exponentielles simplifient les calculs) sous la forme :

$$(11) \quad \tilde{f}(x, t) = a \exp(j\varphi) \exp(j(kx - \omega t)) = \tilde{a} \exp(j(kx - \omega t))$$

où \tilde{a} est l'amplitude complexe.

Le phénomène est alors représenté par la partie réelle de la forme (11).

II.1.2 Onde sphérique

Une source ponctuelle située en $r = 0$ produit une onde sphérique représentée par :

$$(12) \quad f(r, t) = \frac{a}{r} \cos(kr - \omega t)$$

Son amplitude décroît lorsque r augmente. La surface d'onde correspond à la condition $r = \text{const}$ à un instant donné. C'est donc une sphère de rayon r . Les fronts d'onde sont donc des surfaces sphériques concentriques à la source de l'onde placée en $r = 0$.

La vitesse de phase est alors donnée par :

$$v = \frac{dr}{dt} = \frac{\omega}{k}$$

De nombreuses grandeurs physiques comme les champs électrique et magnétique sont des grandeurs vectorielles. On les décrit alors par une onde vectorielle dont l'expression est donnée :

$$\vec{f}(\vec{r}, t) = \vec{a} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$$

où \vec{a} en plus de l'amplitude de l'onde $|\vec{a}|$ indique la direction de l'élongation.

II.2 Principe de superposition

Le principe de superposition s'applique pour des ondes linéaires c'est à dire des ondes de petites amplitudes dont la vitesse de propagation est indépendante de l'amplitude (les ondes de chocs, les ondes acoustiques à grandes amplitudes sollicitent des propriétés non linéaires des milieux et matériaux qu'elles traversent).

L'amplitude des oscillations en un point \vec{r} à l'instant t est la somme des amplitudes des ondes individuelles produites par les sources environnantes.

D'après ce principe, lorsque deux sources produisent des vibrations de petites amplitudes, la vibration résultante reçue en un point de l'espace est la somme des vibrations produites par chaque source.

Considérons deux sources identiques synchrones (donc corrélées) c'est à dire vibrant en phase avec la même pulsation. Un observateur se trouvant à égales distances des deux sources reçoit à chaque instant des vibrations en phase. Par contre si les deux sources ne sont pas à la même distance de l'observateur, il existe un déphasage entre les vibrations reçues qui provient du fait qu'elles n'ont pas parcouru la même distance pour atteindre l'observateur.

Dans le cas d'ondes longitudinales se propageant selon le même axe, le principe de superposition revient à additionner algébriquement les deux vibrations.

Pour les ondes transverses dont les directions de vibrations sont $\vec{\mu}_1$ et $\vec{\mu}_2$, il faut faire l'addition vectorielle. Lorsque $\vec{\mu}_1$ et $\vec{\mu}_2$ ont la même direction, la vibration résultante est la somme algébrique des vibrations.

II.3 Energie transportée par une onde

Une onde est un phénomène de propagation d'énergie et d'impulsion produites par la source et non un phénomène de propagation de matière.

Le calcul de l'énergie dépend de la nature du phénomène ondulatoire.

Prenons comme exemple le cas de la lumière.

La puissance électromagnétique est un flux d'énergie électromagnétique.

Cette puissance peut être répartie selon des surfaces d'onde différente. Une source lumineuse telle qu'une ampoule va rayonner dans toutes les directions et la puissance se répartit sur des sphères centrées sur l'ampoule dont le rayon devient de plus en plus grand au cours de la propagation. Pour une propagation se faisant suivant un faisceau parallèle (laser), la puissance est répartie uniformément sur toute section perpendiculaire du faisceau.

Si le milieu traversé est non dissipatif (pas d'atténuation de l'onde), la puissance totale est conservée. Ainsi pour une onde sphérique la puissance par unité de surface diminue au fur et à mesure que la sphère s'éloigne de la source. Pour le faisceau dont l'étendue est supposée constante, la puissance moyenne surfacique est la même partout dans le faisceau.

Pour exprimer cette puissance, on définit un élément de surface orienté $d\vec{s} = ds \vec{n}$ autour du point M.

Par définition la puissance électromagnétique instantanée dw qui traverse $d\vec{s}$ est le flux du vecteur de Poynting \vec{P}^{11} :

$$dw = \vec{P} \cdot d\vec{s}$$

conduisant à l'intensité¹² instantanée ou densité de flux d'énergie dw/ds électromagnétique.

Les phénomènes lumineux sont observés par le biais d'un récepteur (écran+œil, œil, photodétecteur...) emmagasinant l'énergie pendant un temps donné que l'on nomme temps de réponse (typiquement le temps de réponse de l'œil est de 0.1 s et une photodiode de l'ordre

¹¹ $\vec{P} = \vec{E} \wedge \vec{H}$ où \vec{H} est le champ magnétique lié au champ d'induction magnétique \vec{B} dans le vide par $\vec{H} = \vec{B}/\mu_0$ avec $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$ où $\vec{H} = \vec{B}/(\mu_r \mu_0)$ dans un matériau de perméabilité relative μ_r .

¹² L'intensité instantanée électromagnétique est à distinguer de l'intensité lumineuse qui est définie à partir de la luminance cette dernière étant la puissance de la lumière passant par unité de surface dans c

de 10^{-6} s. La période de l'onde du visible se situe dans la gamme de la femto seconde : 10^{-15} s). Le temps de réponse quel que soit le récepteur évoqué ci-dessus est grand par rapport à la période de l'onde. Cela implique que le récepteur mesure une valeur moyenne sur le temps d'acquisition de l'intensité instantanée.

Ainsi :

$$I(M, t) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{dw}{ds} dt$$

On peut montrer pour une onde monochromatique :

L'intensité électromagnétique moyennée I est proportionnelle la valeur moyenne sur une période du carré de l'amplitude lumineuse selon :

$$(13) \quad I = k \langle a(t)^2 \rangle$$

où $a(t)$ désigne l'amplitude lumineuse à ne pas confondre avec l'amplitude maximale de l'onde, k un facteur de proportionnalité.

En outre ce récepteur est caractérisé par une surface d'acquisition. Ainsi la mesure produite par le récepteur est proportionnelle à l'intensité électromagnétique I .

Comme on ne s'intéresse qu'à des intensités relatives, on prend $k = 2$.

$$(14) \quad I = 2 \langle a(t)^2 \rangle$$

Ainsi le calcul des intensités pourra être exprimé simplement sous forme complexe.

On suppose qu'une source lumineuse monochromatique (1 seule couleur) produit une onde d'amplitude $a(t) = a_0 \cos(\omega t + \varphi)$ en un point M de l'espace. L'intensité moyennée vaut alors :

$$I = a_0^2$$

car la moyenne temporelle de $\cos(\omega t + \varphi)$ vaut $\frac{1}{2}$. On associe à $a(t)$ sa forme complexe $\tilde{a}(t)$ telle que :

$$\tilde{a}(t) = a_0 e^{j(\omega t + \varphi)}$$

Alors l'intensité peut être calculée pour une onde progressive plane monochromatique en utilisant la représentation complexe de l'amplitude comme :

$$I = \tilde{a}(t) \tilde{a}(t)^*$$

où $\tilde{a}(t)^*$ désigne le complexe conjugué de la grandeur complexe $\tilde{a}(t)$.

Remarque

L'onde sphérique se rapproche de plus en plus de l'onde plane lorsque le rayon de la sphère devient très grand par rapport aux distances caractéristiques d'un système.

II.4 Interférences

Les interférences désignent les phénomènes qui se manifestent lors de la superposition de deux ou plusieurs ondes différentes. Elles sont observables lorsque les ondes superposées sont **cohérentes**.

La cohérence revêt deux aspects. On parle de cohérence spatiale et de cohérence temporelle. Elles sont plus largement présentées en annexe du chapitre ou en optique ondulatoire en L3.

La cohérence temporelle est caractérisée par l'aptitude d'une onde à interférer avec une partie retardée d'elle-même. Le temps de cohérence est la durée pendant laquelle la phase de l'onde

est prévisible (on peut dire que l'onde est sinusoïdale). La longueur de propagation de l'onde durant une telle durée est appelée longueur de cohérence.

Une interférence est observable si le retard est inférieur au temps de cohérence qui est une caractéristique de la source lumineuse.

Un laser est une source lumineuse possédant une longueur de cohérence importante. Cela peut varier de l'ordre de la dizaine de centimètre (laser hélium néon) à plusieurs kilomètres pour certaines sources laser.

Une ampoule à filament, la lumière naturelle sont caractérisées par un temps de cohérence caractéristique de la durée des trains d'onde. **En effet la lumière est émise par chaque atome sous forme d'une succession de trains d'onde d'une durée qui avoisine la dizaine de nanoseconde.** Plus précisément, un atome constituant de la matière lorsqu'il se trouve dans un état excité¹³, peut revenir dans son état fondamental (état de plus basse énergie) en émettant un photon dont l'énergie est égale rigoureusement à la différence d'énergie entre l'état excité et l'état fondamental de l'atome. Il s'agit de l'émission spontanée. Ce photon est caractérisé par un train d'onde dont la longueur spatiale est liée à la durée mise par l'atome pour passer d'un état excité à un état désexcité. Chaque émission atomique est constituée d'un train d'onde quasi monochromatique (mais pas strictement : effet Doppler notamment) dont on pourrait considérer qu'il est polarisé rectilignement possédant une amplitude et une phase initiale donnée. En réalité un train d'onde ne présente pas de polarisation. En outre, il existe un élargissement spectral appelé élargissement de Lorentz qui est la conséquence de la durée de vie limitée d'un état excité produisant une incertitude sur l'énergie de l'état en vertu de la relation d'incertitude d'Heisenberg.

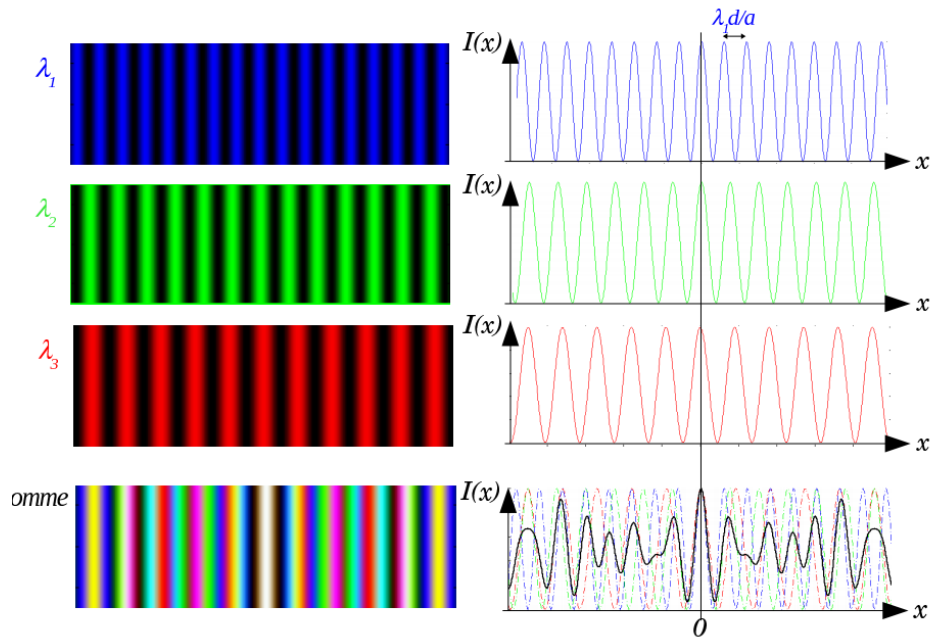
La cohérence spatiale est caractérisée par la distance entre deux points d'une onde pour laquelle l'onde peut interférer avec une partie déplacée d'elle-même.

II.5 L'expérience de Young

Young émet l'idée d'utiliser comme sources deux points d'une même surface d'onde sur la constatation qu'il est impossible de synchroniser deux sources indépendantes vibrant à une fréquence aussi élevée que celle de la lumière visible. **Deux points d'une même surface d'onde peuvent être considérés comme des sources ponctuelles synchrones** d'après le principe de Huygens-Fresnel traité en annexe. Cette expérience, réalisée pour la première fois au début du XIX^{ème} siècle, a mis en évidence un phénomène absolument inexplicable dans le cadre du modèle géométrique.

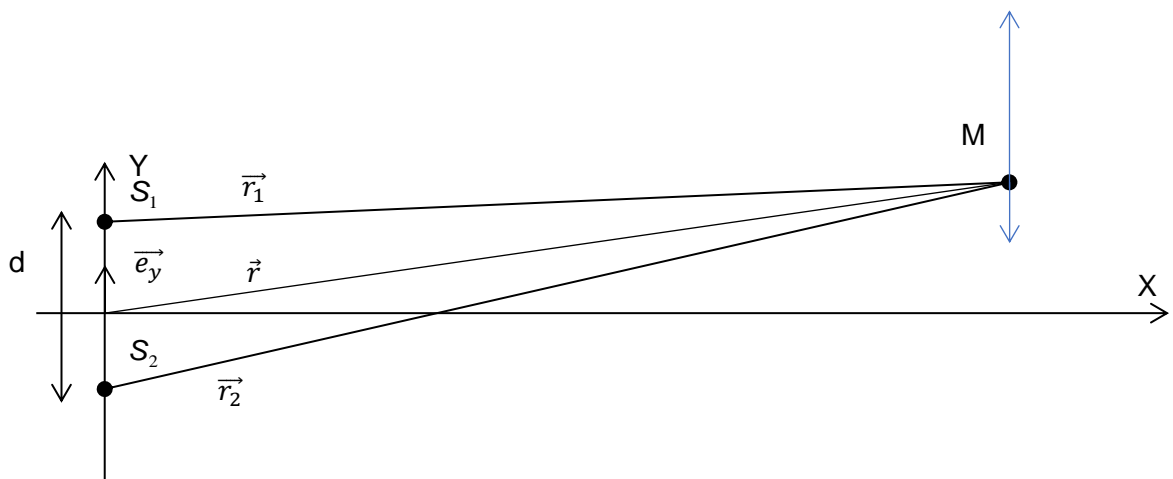
L'expérience originelle d'Young fut publiée en 1803. Elle fut réalisée avec la lumière du soleil. Il perça un trou dans un volet occultant d'une fenêtre d'une pièce plongée dans le noir. Il disposa une feuille épaisse opaque derrière le volet et y perça un trou au moyen d'une aiguille assurant l'obtention d'une aire de cohérence. Le faisceau de lumière de soleil issu de ce trou fut filtré par réduire sa largeur spectrale (et tendre vers une lumière monochromatique) réfléchi avec un miroir et séparé en deux au moyen d'une carte de papier dont l'épaisseur est inférieure à la section du faisceau. En interposant un écran que l'on pouvait déplacer sur le trajet du faisceau séparé, Young put observer des images d'interférence.

¹³ Les niveaux d'énergies d'un atome sont quantifiés comme on s'attachera à le montrer par la suite.



Dans ces figures d'interférences, on pouvait observer des franges claires et sombres manifestant d'un phénomène d'interférences. En outre, de part et d'autre du maximum d'intensité apparaissait une séparation de couleur due à la superposition d'images d'interférences dont les distances interfrange étaient différentes puisque dépendantes de la fréquence et donc de la couleur.

Afin de comprendre le principe de calcul d'interférences, on considère deux sources ponctuelles S_1 et S_2 (appartenant à une même surface d'onde) séparées d'une distance d sur l'axe Oy émettent chacune une vibration sphérique sinusoïdale se propageant à la vitesse c dans l'espace délimité par $x > 0$.



La vibration notée $f_M(t)$ reçue en un point M très éloigné des sources S_1 et S_2 de vecteur de position \vec{r} à l'instant t est la superposition de deux ondes sphériques l'une produite par la source S_1 distante de $r_1 = \left| \vec{r} - \frac{d}{2} \vec{e}_y \right|$ du point M à l'instant $\left(t - \frac{r_1}{c} \right)$ et l'autre produite par la S_2 source distante de $r_2 = \left| \vec{r} + \frac{d}{2} \vec{e}_y \right|$ du point M à l'instant $\left(t - \frac{r_2}{c} \right)$. Si les sources sont synchrones (même fréquence et pas de déphasage), elles sont cohérentes :

$$(15) \quad f_M(t) = \frac{b_1}{r_1} \cos\left(\omega\left(t - \frac{r_1}{c}\right)\right) + \frac{b_2}{r_2} \cos\left(\omega\left(t - \frac{r_2}{c}\right)\right)$$

Ce qui équivaut aussi à :

$$(16) \quad f_M(t) = \frac{b_1}{r_1} \cos(kr_1 - \omega t) + \frac{b_2}{r_2} \cos(kr_2 - \omega t)$$

On suppose que les deux sources produisent des vibrations de même amplitude $b_1 = b_2$ et que la séparation entre les sources est petite devant l'éloignement ($r_1, r_2 \gg d$).

La différence d'éloignement ($r_2 - r_1$) appelée différence de marche dépend de la direction d'observation. Elle est nulle si M coïncide avec Ox et vaut d si M coïncide avec Oy . Pour toute autre direction d'observation, la différence de marche est comprise entre 0 et d .

En raison de la différence d'éloignement de S_1 et S_2 , les amplitudes des vibrations reçues en M ne sont pas rigoureusement égales en particulier dans le cas le plus défavorable où la différence d'éloignement est maximale et égale à d . Dans ce cas précis, r_2 est lié à r_1 par la relation :

$$r_2 = r_1 + d$$

Or la détection se fait au point M à grande distance telles que $r_2, r_1 \gg d$. A l'approximation des grandes distances (d négligé devant r_1^2), on a en utilisant le développement limité de $1/(1+x)$ avec $x \rightarrow 0$:

$$\frac{1}{r_2} = \frac{1}{r_1(1 + d/r_1)} = \frac{1}{r_1} \left(1 - \frac{d}{r_1} + \left(\frac{d}{r_1}\right)^2 + \dots\right) \approx \frac{1}{r_1}$$

De telle manière que :

$$\frac{b_1}{r_1} \cong \frac{b_2}{r_2} = a_0$$

Cette conclusion se vérifie à plus forte raison pour toutes les autres directions d'observation.

Dans l'approximation des grandes distances (par rapport à d), les ondes sphériques sont assimilables à des ondes planes et le seul effet de la différence de marche est de déphaser l'une par rapport à l'autre les vibrations reçues en M (addition algébrique des deux vibrations ayant même direction).

L'intensité étant la valeur moyenne sur une période du carré de la vibration résultante :

$$I = 2 \left\langle \left[a_0 \cos \omega \left(t - \frac{r_1}{c} \right) + a_0 \cos \omega \left(t - \frac{r_2}{c} \right) \right]^2 \right\rangle$$

Si on utilise la représentation complexe des amplitudes, l'amplitude résultante $\tilde{f}_M(t)$ d'après le principe de superposition est la somme des amplitudes complexes $a_0 e^{j(\omega t + \varphi_1)}$ et $a_0 e^{j(\omega t + \varphi_2)}$ avec $\varphi_i = -\omega \frac{r_i}{c}$.

L'intensité au point M étant donnée par $I = \tilde{f}_M(t) \tilde{f}_M(t)^*$, on calcule :

$$I = (a_0 e^{j(\omega t + \varphi_1)} + a_0 e^{j(\omega t + \varphi_2)})(a_0 e^{-j(\omega t + \varphi_1)} + a_0 e^{-j(\omega t + \varphi_2)})$$

Soit :

$$I = a_0^2 |e^{j\omega t}|^2 (e^{j\varphi_1} + e^{j\varphi_2})(e^{-j\varphi_1} + e^{-j\varphi_2})$$

Ou encore :

$$I = a_0^2 [1 + 1 + 2 \operatorname{Re}\{e^{j\varphi_1} e^{-j\varphi_2}\}]$$

On a donc :

$$I = 2a_0^2 \left[1 + \cos \frac{\omega}{c} (r_2 - r_1) \right] = 2a_0^2 [1 + \cos k(r_2 - r_1)]$$

I atteint son maximum lorsque $\cos k(r_2 - r_1) = 1$ c'est à dire lorsque :

$$k|r_2 - r_1| = n 2\pi \text{ avec } n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

soit :

$$|r_2 - r_1| = n \frac{2\pi}{k} = n \lambda$$

La différence de marche est un multiple entier de la longueur d'onde. On dit alors que l'interférence est constructive.

La puissance reçue est nulle lorsque $\cos k(r_2 - r_1) = -1$ soit :

$$|r_2 - r_1| = (2n + 1) \frac{\lambda}{2}$$

Lorsque la différence de marche est un nombre entier impair de demi-longueur d'onde, on dit alors que l'interférence est destructive.

II.6 Annexe : la cohérence

Les interférences désignent les phénomènes qui se manifestent lors de la superposition de deux ou plusieurs ondes différentes. Elles sont observables lorsque les ondes superposées sont **cohérentes**.

S'il s'agit de lumière, les ondes émises par la matière possèdent une nature électromagnétique. Plus précisément, un atome constituant de la matière lorsqu'il se trouve dans un état excité¹⁴, peut revenir dans son état fondamental (état de plus basse énergie) en émettant un photon dont l'énergie est égale rigoureusement à la différence d'énergie entre l'état excité et l'état fondamental de l'atome. Il s'agit de l'émission spontanée. Cette dernière possède un caractère temporel aléatoire. Dans un milieu où règne une grande agitation atomique (soleil, filament d'une ampoule), un atome réalise ces transitions près de 100 millions de fois par seconde.

Les photons émis par les atomes d'une source lumineuse ordinaire correspondent à des radiations d'une durée très courte (typiquement $\tau = 10^{-10}$ s dans le cas de la lumière naturelle $\tau = 10^{-10}$ s) que l'on appelle train d'onde (**signal sinusoïdale d'extension finie dans le temps**) contenant $(\tau \times c)/\lambda$ oscillations. La longueur spatiale du train d'onde est liée à la durée mise par l'atome pour passer d'un état excité à un état désexcité. Chaque émission d'un seul atome est constituée d'un train d'onde quasi monochromatique polarisé rectilignement possédant une amplitude et une phase initiale donnée.

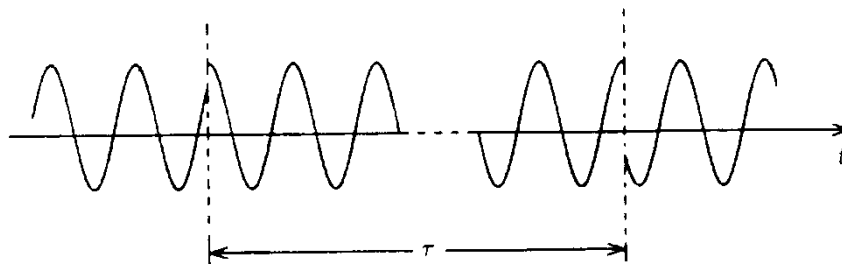


Figure 1 – Train d'ondes

¹⁴ Les niveaux d'énergies d'un atome sont quantifiés comme on s'attachera à le montrer par la suite.

Dans le cas de la lumière naturelle, les différents atomes constituant la source émettent une succession ininterrompue de trains d'onde de durée caractéristique τ_c appelée temps de cohérence temporelle qui est grand devant la période $\tau_c \gg T$ (T de l'ordre de quelques femto seconde dans le visible). Ces trains d'onde ne possèdent pas entre eux de relation de phase, ni d'amplitude ni de direction de polarisation (variations aléatoires). La direction de polarisation, l'amplitude et la phase sont des grandeurs qui varient de manière aléatoire d'un train d'onde à un autre.

Il existe des sources lumineuses à spectres de raies et des sources à spectre continu. Les premières correspondent à des lampes à décharges. Une ampoule ou tube contient une vapeur d'un corps pur métallique (Mercure, sodium). L'application d'une différence de potentiel entre la cathode et l'anode du tube produit l'ionisation d'atome métallique. Les électrons libérés sont attirés vers l'électrode positive, l'anode. Ce flux d'électron induit par collision électron/atome soit une ionisation amplifiant le flux d'électrons soit une excitation de l'atome métallique qui peut alors émettre un photon de manière spontanée. Les raies observées sont caractéristiques du métal vaporisé.

Le soleil ou une ampoule à incandescence (filament de tungstène chauffé à très haute température) sont des sources à spectre continu.

Ceci nous amène à préciser les conditions d'interférences. Supposons que l'on superpose deux vibrations scalaires au point M :

$$\begin{cases} a_1(M, t) = A_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) \\ a_2(M, t) = A_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) \end{cases}$$

La vibration résultante en M à l'instant t est $a(M, t) = a_1(M, t) + a_2(M, t)$.

Les deux vibrations n'interféreront pas si :

1. les deux sources ne sont pas synchrones : $\omega_1 \neq \omega_2$;
2. $\omega_1 = \omega_2$ mais les vibrations sont issues de deux sources de lumières indépendantes du fait des phases aléatoires $\varphi_1(M)$ et $\varphi_2(M)$; même à supposer que les amplitudes soit les mêmes $A_1 = A_2 = A_0$ et en appliquant le principe de superposition, on montre que le calcul de l'intensité en moyennant sur une période vaut :

$$I(M) = 2 \langle (a_1(M, t) + a_2(M, t))^2 \rangle = 2A_0^2 (1 + \cos(\varphi_1 - \varphi_2))$$

La valeur $(\varphi_1 - \varphi_2)$ variant aléatoirement au cours du temps, un calcul de valeur moyenne sur une durée grande devant la période (temps de réponse du détecteur) conduirait à une somme de termes $\cos(\varphi_1 - \varphi_2)$ nulle en valeur moyenne.

Il est à noter que le calcul à partir de la formulation complexe de l'amplitude reste valide lorsque l'amplitude résulte de la superposition de deux vibrations. Ainsi, le calcul :

$$I(M) = \tilde{a}(M, t) \tilde{a}^*(M, t)$$

avec $\tilde{a}(M, t) = \tilde{a}_1(M, t) + \tilde{a}_2(M, t)$ et $\tilde{a}_j(M, t) = A_0 e^{j\omega t} e^{j\varphi_j}$ conduira à un résultat identique.

On a donc en définitive :

$$I(M) = 2A_0^2$$

soit la somme des intensités produites par chaque source.

3. les vibrations provenant d'une même source de lumière sont issues de deux trains d'onde différents (phases aléatoires) pour les mêmes raisons que ci-haut.

L'interférence est donc plus facilement mise en évidence si une seule source de lumière est utilisée. L'interférence d'un faisceau de lumière avec une partie retardée de lui-même (interféromètre de Michelson) est observable lorsque le retard est plus faible que le temps de

cohérence où lorsque la différence de longueur entre les deux parcours empruntés par faisceaux est plus faible que la longueur de cohérence. On parle alors de cohérence temporelle.

Lorsque l'on fait interférer un champ lumineux avec une version déplacée spatialement de lui-même, la superposition doit s'appliquer à des vibrations (du champ) cohérentes spatialement (fentes d'Young) pour donner une figure d'interférence.

Cette cohérence spatiale implique qu'en deux points de la section du faisceau la phase est la même s'ils sont situés à égale distance de la source. Bien évidemment une source de lumière étendue spatialement ne présente pas de cohérence spatiale car les ondes émises par deux points éloignés de la source ne présentent pas le même vecteur d'onde.

Il existe une aire dite de cohérence propre à chaque source lumineuse qui garantit que pour une séparation spatiale contenue dans l'aire de cohérence, l'interférence est observable. Pour la lumière du soleil cette aire est l'ordre de 410^{-2}mm^2 raison pour laquelle les interférences lumineuses ne sont pas observées dans la vie courante avec la lumière du soleil.

Un laser est une source de lumière qui offre une cohérence spatiale et temporelle.

Pour un laser, chaque train d'onde présente une cohérence temporelle autorisant la manifestation de phénomènes d'interférence.

La lumière naturelle émise par le soleil ou par une source de lumière blanche possède un spectre continu et est spatialement incohérente en l'état. C'est la raison pour laquelle il est nécessaire de faire passer la lumière du soleil dans un collimateur afin de réduire l'étendue spatiale de la source (assimilée à l'aire du trou) pour garantir une cohérence spatiale indispensable à l'observation d'interférence. La lumière possédant un spectre continu les figures d'interférence propres à chaque fréquence se superposeront comme on le verra dans le chapitre suivant.

II.7 Annexe : le principe de Huyguens-Fresnel

La propagation d'une onde en optique peut être décrite par le principe de Huygens- Fresnel. Ce dernier est un principe de construction des fronts d'onde lors de la propagation des ondes : chaque point de l'espace et donc d'une surface d'onde au temps peut être considéré comme une source ponctuelle.

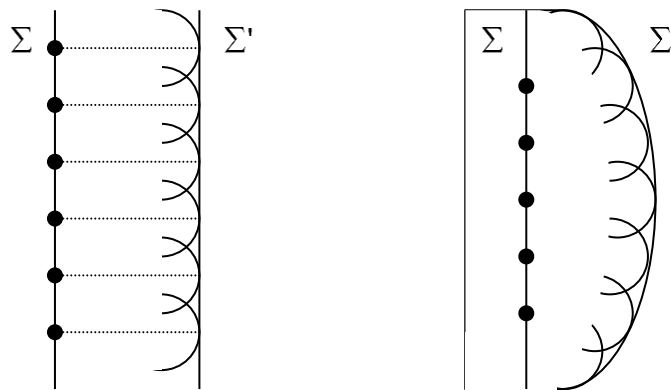


Figure 2 – Principe de Huyghens-Fresnel dans un milieu homogène et un milieu inhomogène

Un point recevant une onde réémet une onde sphérique de même fréquence, même amplitude et même phase.

Donc toutes les sources d'une surface d'onde plane Σ sont synchrones et elles produisent des ondelettes sphériques élémentaires en phase avec l'onde incidente.

Supposons qu'à $t = 0$, le maximum de l'onde passe par le plan Σ :

- chaque point de Σ émet une onde sphérique. Après une durée t , un point situé à une
- distance ct ne recevra qu'une seule onde sphérique, celle émise par le point de Σ le
- plus proche à $t = 0$. Chaque point situé sur ce plan Σ' parallèle aura donc une même
- amplitude.
- Un point situé au-delà de Σ' possède une amplitude nulle (l'onde ne l'a pas atteint).
- Un point situé avant Σ' reçoit des ondes produites par de nombreux points de Σ mais
- toutes ces ondes interfèrent de manière destructive car elles possèdent un déphasage
- différent.

Le plan Σ' correspond donc à la surface d'onde Σ propagée à une vitesse c durant un intervalle de temps t .

III LA LUMIERE

La lumière est l'ensemble des rayonnements électromagnétiques visibles (ou proches du visible) c'est à dire susceptible d'être perçus par l'œil. Elle correspond à des phénomènes ondulatoires dont la longueur d'onde est comprise entre 380 et 780 nm (10^{-9} mètre). Elle joue un rôle tout particulier en physique quantique. En effet, la description classique de la lumière (géométrie, théorie électromagnétique) fut profondément mise à mal pour des faits expérimentaux tels que le rayonnement du corps noir, l'effet photo électrique et de l'effet Compton. Ces expériences furent à l'origine de la théorie des quanta de lumière. Deux d'entre-elles seront présentées.

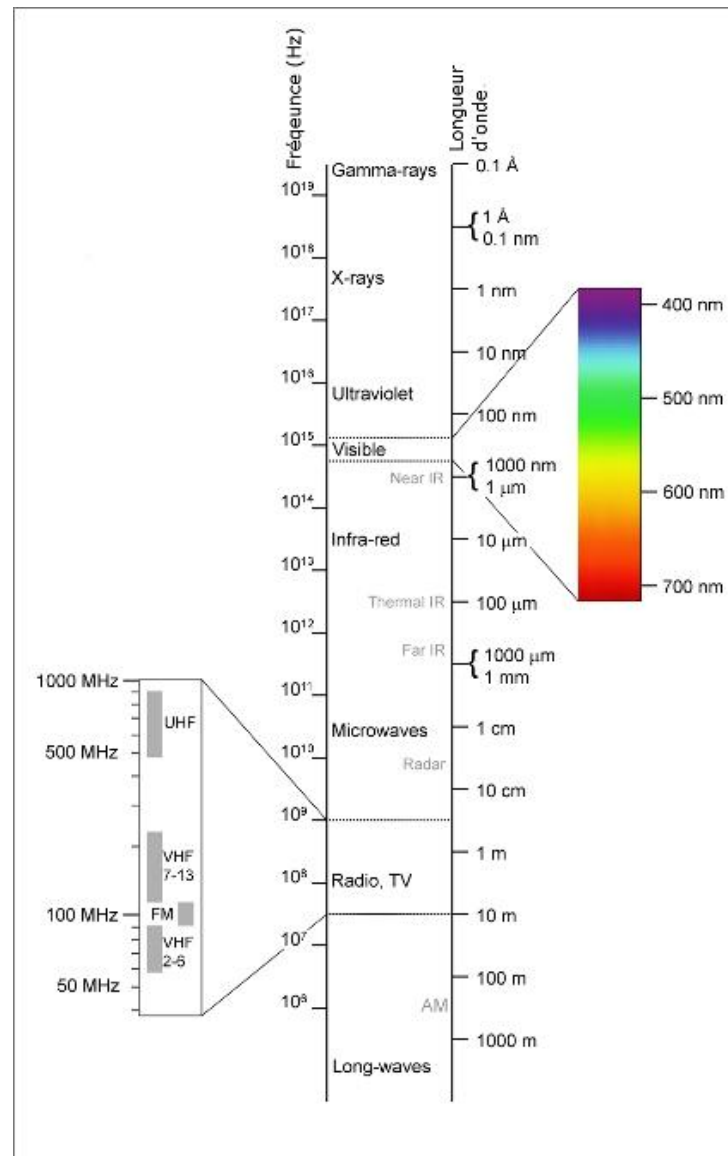


Figure 3 – Spectre des ondes électromagnétique

III.1 La lumière mise en lumière

La lumière dans toutes ses manifestations observables fut certainement un des phénomènes physiques qui suscita le plus grand intérêt scientifique. Pendant près de deux siècles, deux conceptions allaient se développer et s'affronter : la théorie corpusculaire et la théorie ondulatoire.

Au cours de la première moitié du 17^{ème} siècle, le modèle décrivant les principaux phénomènes lumineux est connu sous le nom d'optique géométrique (Kepler¹⁵ : propagation rectiligne de la lumière, Descartes¹⁶ : loi de la réfraction).

Pour Newton¹⁷, la lumière était composée de particules dont les masses différentes étaient soumises à une action attractive exercée par un corps transparent sur les corpuscules de lumière qui le traverse. Le modèle de Newton imposera cette conception bien longtemps encore après sa mort survenue en 1727.

Cependant, des physiciens s'opposent aux conclusions de Newton. On peut citer Huygens¹⁸ qui imagine la lumière comme une vibration se transmettant de proche en proche dans un milieu l'éther, fluide matériel dont les propriétés mécaniques restaient à définir. Cette approche lui permit notamment de rendre compte de la diffraction.

Plus tard, Young¹⁹ et Fresnel²⁰ apportèrent leurs contributions. Le premier en découvrant, en 1801, un phénomène interférentiel inédit (la fameuse expérience des fentes d'Young que nous exposerons par la suite) et en mesurant les longueurs d'ondes de la lumière. Le second en découvrant, en 1819, la nature transversale des ondes lumineuses et, grâce à celle-ci, en expliquant de façon convaincante tous les phénomènes de polarisation.

Maxwell²¹, en 1865 puis en 1873, précisera la nature électromagnétique de cette onde. Cela faisait de la lumière un membre parmi d'autres de la grande famille des ondes électromagnétiques.

En 1905, A. Einstein bouleversera ces certitudes ondulatoires si difficilement établies. Il prédira, en effet, l'existence du corpuscule de lumière (le photon) dont la conséquence fut l'introduction du concept de dualité onde corpuscule. Cet acte sera l'une des pierres fondatrices d'une nouvelle physique, la physique quantique.

III.2 Optique géométrique et sa limite de validité

L'optique géométrique décrit l'interaction de la lumière avec les objets dont les dimensions sont grandes devant les longueurs d'ondes caractéristiques de cette lumière. L'optique géométrique est fondée sur le concept de rayon lumineux : ligne joignant un point de la source lumineuse à un point de l'objet éclairé dans un milieu homogène. Son fondement est contenu dans le principe de Fermat²² qui permet de déduire toute l'optique géométrique.

On définit le chemin optique Δ comme étant le produit du trajet géométrique d d'un rayon de lumière et de l'indice de réfraction n du milieu dans lequel il se propage : $\Delta = d n = d \frac{c}{v}$

Le principe de Fermat stipule que le chemin optique parcouru par un rayon lumineux entre deux points quelconques A et B est stationnaire par comparaison avec les chemins optiques infiniment voisins ayant les mêmes extrémités. Le rayon lumineux emprunte donc le chemin dont le temps de parcours présente un extremum. Il est donc stationnaire lors d'une petite déformation de la trajectoire.

La lumière se propage d'un point à un autre sur des trajectoires telles que la durée de parcours est stationnaire (extremum).

¹⁵ Johann Kepler (1571 - 1630)

¹⁶ René Descartes (1596 - 1650)

¹⁷ Isaac Newton (1643 - 1727)

¹⁸ Christiaan Huygens (1629 - 1695)

¹⁹ Thomas Young (1773 - 1829)

²⁰ Augustin Fresnel (1788 - 1827)

²¹ James Clark Maxwell (1831 - 1879)

²² Pierre de Fermat (1601 - 1665)

Ce principe permet de retrouver la loi de réfraction de Snell²³ - Descartes et permet d'expliquer la formation des images par une lentille.

Examinons la limite de validité de l'optique géométrique. Considérons pour cela un objet ponctuel placé en O sur l'axe de symétrie d'une lentille convergente. Le point I , image du point O se trouve sur l'axe de symétrie.

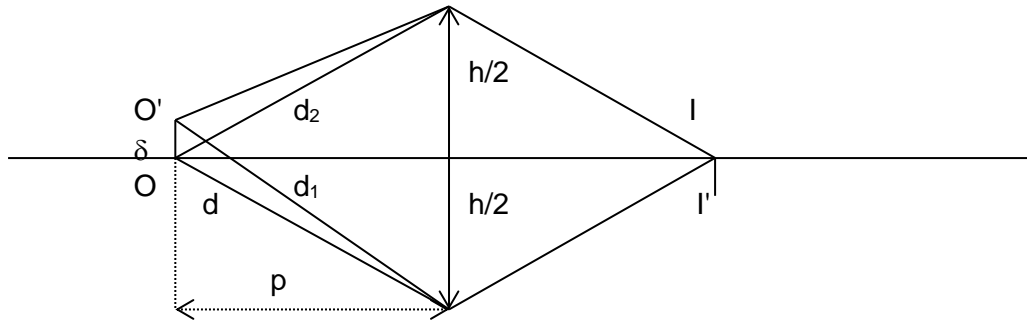


Figure 4 - Formation d'une image par une lentille

Rappelons que l'image optique d'un point O est le point de rencontre des rayons issus du point O (image réelle) ou de leurs prolongements (image virtuelle).

Considérons un autre objet placé en O' . D'après le principe de Fermat, l'image de O' en un point I' . Lorsque O' se déplace vers O son image I' se déplace vers I et la différence de temps de parcours $t_1 - t_2 = \frac{d_1 - d_2}{c}$ entre les trajets d_1 et d_2 passant par les extrémités de la lentille tend vers zéro.

Cependant, d'après l'optique géométrique deux points d'un objet ont des images distinctes quelle que soit leur séparation.

Or l'optique géométrique est une approximation de l'optique ondulatoire valide dans la limite des courtes longueurs d'onde, c'est-à-dire dans la mesure où la longueur d'onde est petite devant toute distance caractéristique intervenant dans une expérience (largeur de la fente d'un collimateur, distance sur laquelle la variation d'un indice de réfraction est appréciable).

Revenons à notre problème : lorsque δ devient petit, la différence entre les temps de parcours $t_1 - t_2$ entre les trajets d_1 et d_2 devient comparable à la période de l'onde. L'optique géométrique n'est plus valide et les images se superposent obtenant une image floue. On dit que le pouvoir séparateur d'une lentille est limité par la nature ondulatoire de la lumière.

Cherchons la plus petite distance entre deux points de l'objet qui ont des images distinctes.

Pour cela on impose que la différence entre les temps des parcours d_1 et d_2 est égale à la période T de l'onde.

$$d_2^2 = p^2 + \left(\frac{h}{2} - \delta\right)^2 \text{ et } d_1^2 = p^2 + \left(\frac{h}{2} + \delta\right)^2 \text{ théorème de Pythagore}$$

où p est la distance entre l'objet et la lentille tandis que h est la hauteur de cette dernière.

On en déduit :

$$d_1^2 - d_2^2 = 2h\delta$$

c'est à dire :

²³ Willebrord Snell (1580 - 1626),

$$d_1 - d_2 = \frac{2h\delta}{d_1 + d_2}$$

Puisque δ est petit devant p on peut écrire à une très bonne approximation :

$$d_1 + d_2 \cong 2d$$

d'où :

$$d_1 - d_2 = \frac{h\delta}{d}$$

En faisant intervenir l'ouverture angulaire de la lentille cette relation devient :

$$d_1 - d_2 = \frac{h}{2d} \times 2\delta$$

$$d_1 - d_2 = \sin(\theta/2) \times 2\delta$$

Si :

$$t_1 - t_2 = T$$

on a

$$d_1 - d_2 = \lambda$$

d'où on tire l'expression :

$$\delta = \frac{\lambda}{2 \sin(\theta/2)}$$

Plus δ est petite, plus le pouvoir séparateur est grand. Pour l'optimiser il faut prendre λ aussi courte que possible (mais restant dans le spectre visible) et une ouverture angulaire aussi grande que possible.

III.3 Théorie ondulatoire de la lumière

La physique théorique classique trouve dans la théorie de Maxwell la description la plus complète de la lumière dans le cadre du modèle ondulatoire. Toute lumière a pour source la matière qui d'une façon ou d'une autre est excitée. Nous pouvons préciser que la source ultime du rayonnement est la charge électrique accélérée.

Dans la théorie de Maxwell un faisceau lumineux est décrit par une onde électromagnétique de composantes électrique \vec{E} et d'induction magnétique \vec{B} .

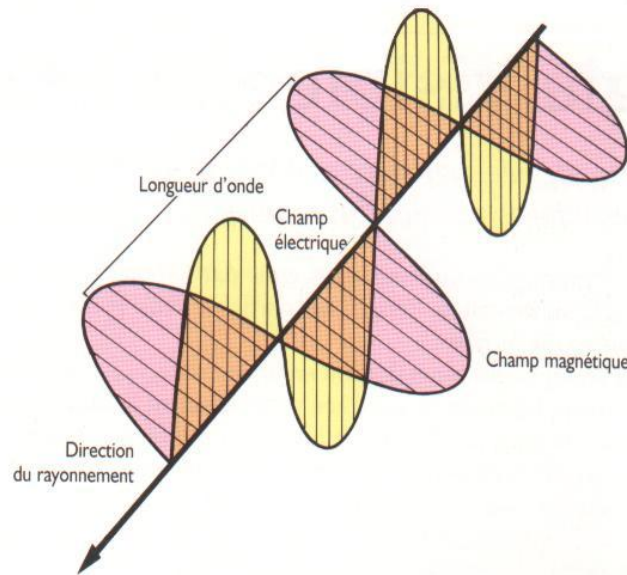


Figure 5 - Champ d'induction magnétique et électrique du rayonnement

Selon cette théorie le champ électrique et le champ d'induction magnétique oscillent de telle manière qu'en un point donné de l'espace les champs électrique et magnétique sont des fonctions sinusoidales du temps. Ils sont mutuellement perpendiculaires et en phase (**Figure 5**). La direction de propagation \vec{k} est perpendiculaire à ces deux champs de telle manière qu'en chaque point et à chaque instant :

$$\vec{B} \cdot \vec{k} = \vec{E} \cdot \vec{k} = 0$$

Une source ponctuelle émet de façon isotrope dans un milieu homogène des ondes lumineuses sphériques. On peut utiliser des lentilles de verre en forme de calotte pour transformer les ondes sphériques en ondes planes.

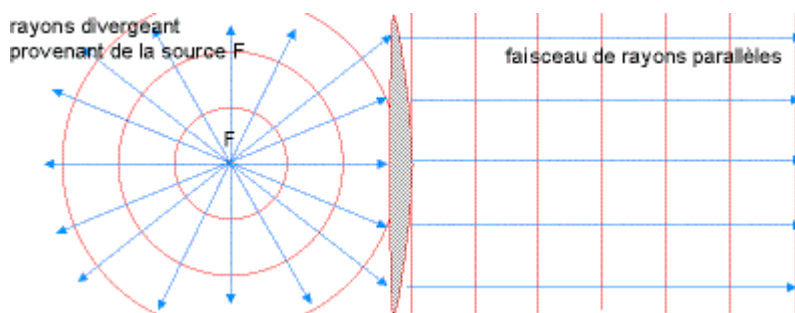


Figure 6 - Ondes sphériques et planes

Les champs électrique et magnétique oscillants $\vec{E}(\vec{r}, t)$ et $\vec{B}(\vec{r}, t)$ sont des fonctions sinusoides de la seule variable ou phase : $(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)$

L'induction magnétique \vec{B} et le champ électrique \vec{E} sont liés par l'équation :

$$(17) \quad \vec{B} = \frac{\vec{n}}{c} \wedge \vec{E} \text{ soit } \vec{B} = \frac{\vec{k}}{\omega} \wedge \vec{E} \text{ avec } \vec{k} = k\vec{n}$$

Leurs amplitudes sont donc proportionnelles puisque :

$$B_0 = \frac{E_0}{c}$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide.

La densité d'énergie volumique est définie comme étant la quantité d'énergie rayonnée par unité de volume (mesurée en joule/m^3).

Elle comprend une contribution de nature électrique et une autre de nature magnétique. Ces contributions sont données respectivement par :

$$\frac{1}{2} \varepsilon_0 E_0^2 \quad \text{et} \quad \frac{1}{2} \frac{B_0^2}{\mu_0}$$

$\varepsilon_0 = 8.85415 \cdot 10^{-12} \text{ Fm}^{-1}$ (Farad²⁴) étant la permittivité et $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Hm}^{-1}$ (Henry²⁵) la perméabilité du vide. Puisque ces constantes sont liées par la condition $\varepsilon_0 \mu_0 c^2 = 1$, les densités d'énergie électrique et d'énergie magnétique sont égales.

III.4 La théorie ondulatoire et la formation des images

L'interprétation de l'expérience de Young rejette le modèle géométrique comme modèle acceptable pour décrire la lumière. Cette expérience prouve que la nature ondulatoire de la lumière est incontestable. Cependant, le modèle ondulatoire doit être en mesure d'expliquer les phénomènes lumineux dont l'optique géométrique rendait compte avec succès. C'est le cas de la formation d'une image d'un objet ponctuel par une lentille convergente.

L'objet ponctuel produit des ondes sphériques divergentes. Les surfaces d'onde sont perpendiculaires aux rayons. En pénétrant dans la lentille la vitesse diminue et la surface d'onde s'en trouve déformée. La partie centrale est davantage retardée que les parties latérales du fait d'un plus grand parcours dans le milieu transparent. La forme de la lentille est telle que la courbure de la surface d'onde se trouve inversée. Après la traversée de la lentille, les ondes sont donc transformées en ondes sphériques convergentes. La surface d'onde est encore perpendiculaire aux rayons mais son rayon de courbure est de plus en plus petit. La position de l'image est le centre de courbure de cette onde sphérique convergente.

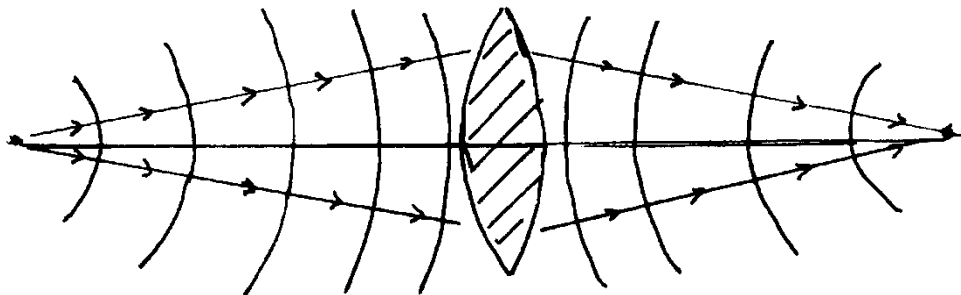


Figure 7 - Ondes et lentille

III.5 La polarisation de la lumière

D'après la théorie de Maxwell, la lumière est une onde électromagnétique transversale. Le champ électrique et le champ magnétique sont perpendiculaires à la direction de propagation. Par définition, le plan de polarisation contient la direction de propagation et celle du champ électrique. Il ne faut pas confondre avec la surface d'onde.

Une onde est non polarisée si \vec{E} a une direction qui varie aléatoirement dans le plan perpendiculaire à \vec{k} . Ce plan est appelé plan d'onde. C'est le cas de la lumière naturelle.

Une onde est dite polarisée rectilignement si \vec{E} possède une direction bien définie dans le plan d'onde.

²⁴ Capacité d'un condensateur entre les armatures duquel apparaît une différence de potentiel de 1 volt lorsqu'il est chargé d'une quantité d'électricité de 1Coulomb. $F=C/V=As/V$

²⁵ Inductance électrique d'un circuit fermé dans lequel une force électromotrice de 1 volt est produite lorsque le courant qui parcourt le circuit varie uniformément à raison d'1 ampère par seconde. $H=Vs/A$

Prenons le cas le plus simple d'une onde dont la direction de propagation est Oz orientée vers les x positifs.

L'état de polarisation le plus général peut être formulé :

$$(18) \quad \vec{E}_x = E_{0x} \vec{e}_x \cos(kz - \omega t)$$

$$(19) \quad \vec{E}_y = E_{0y} \vec{e}_y \cos(kz - \omega t + \varphi)$$

E_{0x} , E_{0y} et φ sont des nombres indépendants du temps.

Les composantes E_x et E_y oscillent avec une fréquence identique mais possèdent des amplitudes et des phases différentes.

Le vecteur \vec{E} décrit dans le plan xOy une ellipse dont la forme (excentricité e et l'orientation angle α) définissent complètement la polarisation du faisceau lumineux.

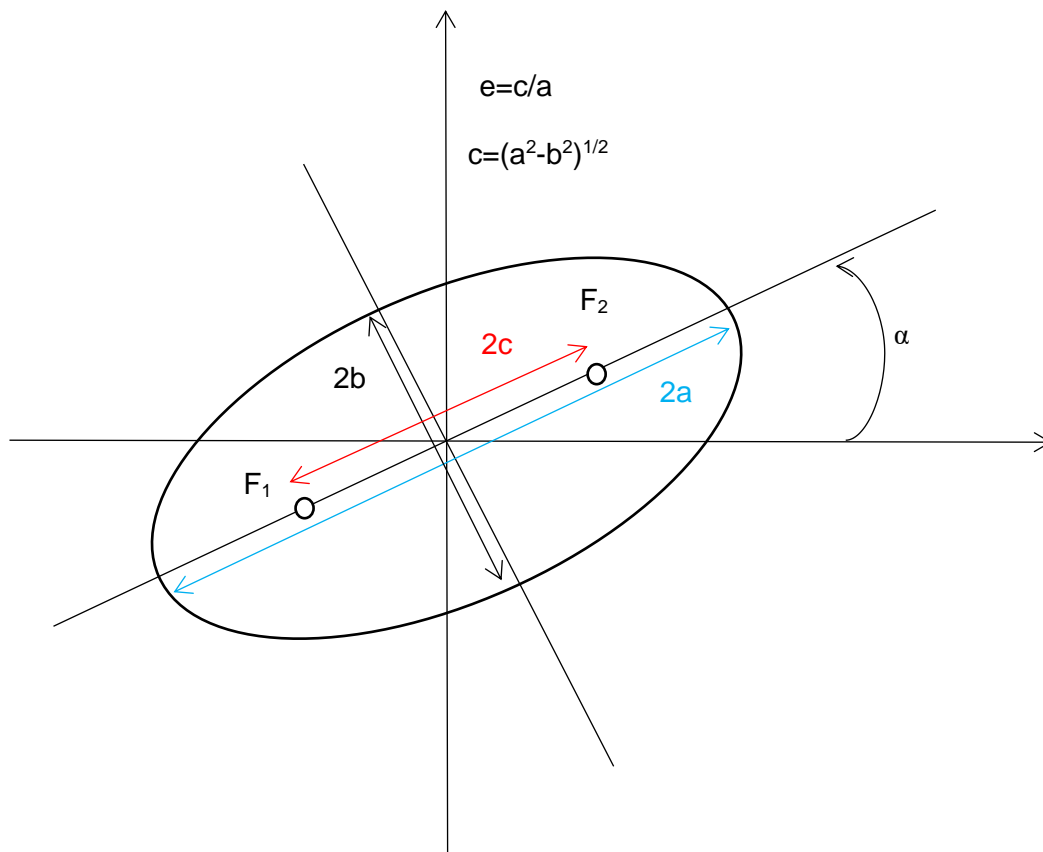


Figure 8 - Polarisation elliptique

Si $\varphi = 0$ (2π)

On a :

$$(20) \quad \vec{E} = (E_{0x} \vec{e}_x + E_{0y} \vec{e}_y) \cos(kz - \omega t)$$

On définit donc le vecteur polarisation :

$$(21) \quad \vec{\varepsilon} = (E_{0x}\vec{\varepsilon}_x + E_{0y}\vec{\varepsilon}_y) / \sqrt{E_{0x}^2 + E_{0y}^2}$$

dont la direction θ représentant l'angle entre la direction de \vec{E} et l'axe Ox reste constante.

$$\tan(\theta) = \frac{E_y}{E_x} = \frac{E_{0y}}{E_{0x}}$$

Ainsi l'orientation du plan de polarisation est constante lorsque $\varphi = 0$. Dans ce cas la polarisation de la lumière est dite **rectiligne ou linéaire**.

Lorsque $E_{0x} = 0$, la lumière est polarisée suivant Oy et vice-versa.

Dans le cas le plus général la polarisation de l'onde est une combinaison linéaire de ces deux états de polarisation élémentaires.

Considérons le cas où $E_{0x} = E_{0y} = E_0$ et $\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$. On a alors :

$$(22) \quad \vec{E}_y = E_0\vec{\varepsilon}_y \cos\left(kz - \omega t \pm \frac{\pi}{2}\right) = \mp E_0\vec{\varepsilon}_y \sin(kz - \omega t)$$

Ainsi :

$$(23) \quad \vec{E} = E_0(\vec{\varepsilon}_x \cos(kz - \omega t) \mp \vec{\varepsilon}_y \sin(kz - \omega t))$$

La norme du champ électrique est donc constante puisque $\vec{\varepsilon}$ est un vecteur unitaire.

Par ailleurs la direction du champ électrique varie en fonction de la position et du temps. En effet :

$$(24) \quad \tan(\theta) = \frac{E_y}{E_x} = \mp \tan(kz - \omega t)$$

Pour un observateur placé en un point de l'axe Oz , par exemple en $z = 0$, l'équation (24) devient :

$$\tan(\theta) = \pm \tan(\omega t)$$

La direction du champ électrique par rapport à Ox est donnée par $\theta = \omega t$ lorsque $\varphi = \frac{\pi}{2}$ et par $\theta = -\omega t$ lorsque $\varphi = -\frac{\pi}{2}$.

Dans le premier cas un observateur regardant vers la source perçoit un champ électrique tournant dans le sens anti-horaire. La polarisation de l'onde est dite circulaire gauche (**Figure 9**).

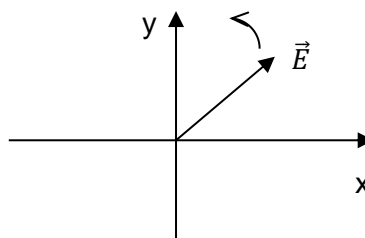


Figure 9 - Polarisation circulaire gauche

Dans le second cas il s'agit de polarisation circulaire droite.

NB

L'état de polarisation le plus général peut toujours être considéré comme une superposition de ces deux états de polarisation particuliers.

Un polariseur est un appareil qui produit à sa sortie une onde de polarisation bien définie quelle que soit l'onde incidente. Il existe des polariseurs linéaires qui donnent à la sortie une lumière de polarisation rectiligne et des polariseurs circulaires qui donnent une lumière de polarisation circulaire (gauche ou droite).

En 1887, Hertz réussit à produire et à détecter des ondes électromagnétiques en étudiant la propagation d'ondes électromagnétiques qui font passer l'énergie d'un circuit électrique à un autre sans l'aide d'un fil conducteur. Il confirme ainsi l'hypothèse de Maxwell.

III.6 Le rayonnement du corps noir

Le terme "rayonnement" se rapporte aux ondes électromagnétiques prévues par la théorie de Maxwell décrites brièvement ci-dessus. L'expérience a montré que tout corps porté à une certaine température rayonne de l'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique.

L'émission est un phénomène dans lequel un corps porté à une température supérieure au zéro absolu (-273.15 °C) convertit une partie de son énergie interne (microscopique) en émettant des rayonnements électromagnétiques continûment distribués sur toutes les fréquences.

Lorsque le corps est blanc, son maximum d'émission est situé à peu près vers le milieu du spectre visible, toutes les longueurs d'onde (couleurs) étant représentées presque à égalité d'où la lumière blanche. Il paraît évident que le maximum d'intensité se déplace vers les courtes longueurs d'onde lorsque la température du corps augmente. Le rayonnement émis par un corps révèle l'agitation chaotique des particules chargées accélérées que le corps contient.

L'absorption c'est l'opération inverse. Quand la surface d'un corps reçoit un flux d'énergie²⁶, la fraction absorbée est transformée en énergie interne. Si un corps est en équilibre thermique avec son environnement sa température est constante. Ainsi il doit émettre et absorber la même quantité d'énergie de rayonnement par unité de temps. Le rayonnement émis et absorbé dans ces conditions est appelé rayonnement thermique ou radiation thermique.

La réflexion ou diffusion se rapporte à la manière suivant laquelle le flux qui n'est pas absorbé est renvoyé. On parle de réflexion lorsque le renvoi obéit aux lois de l'optique géométrique ($\theta_{inc} = \theta_{ref}$). Par contre si le renvoi se fait dans toutes les directions sans changement de fréquence (diffusion élastique) ou avec changement (diffusion inélastique), il s'agit de diffusion.

Pour étudier le rayonnement thermique d'un corps, il faut idéalement concevoir un système matériel dont la surface absorbe intégralement et uniformément toute radiation venant de l'extérieur. Dans ces conditions tout le rayonnement émis par la surface a une seule origine provenant du rayonnement thermique à l'exclusion de tout autre mode d'émission (diffusion, réflexion).

Un corps noir désigne formellement un corps absorbant intégralement la radiation incidente qu'il reçoit sans réflexion ou transmission.

²⁶ Un flux est une quantité d'énergie traversant une unité de surface pendant une unité de temps.

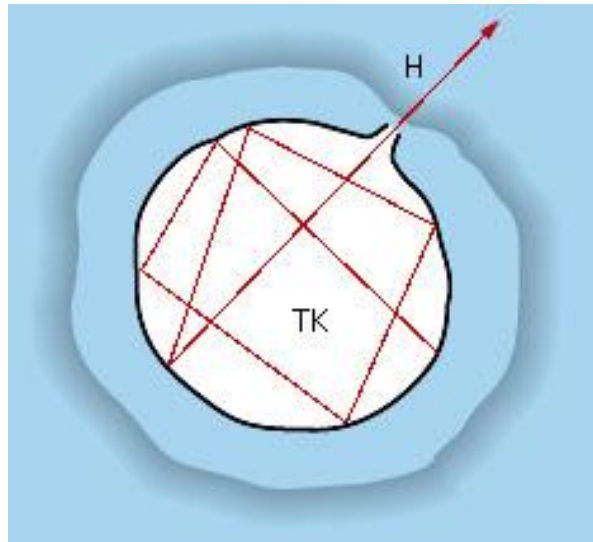


Figure 10 - corps noir idéalisé.

Pour un observateur extérieur, le petit orifice apparaît comme une surface de corps noir car chaque radiation incidente pénétrant dans le trou est intégralement absorbée.

Ce trou apparaît noir seulement à basse température pour laquelle la plupart de l'énergie est émise à des longueurs d'onde supérieures à celles du visible (infra rouge).

En installant un spectromètre devant le petit trou, on peut étudier le rayonnement en mesurant son énergie en fonction des différentes longueurs d'onde émises.

Les premières mesures d'émittance spectrale²⁷ du corps noir furent faites par Lummer²⁸, Kurlbaum²⁹ et Pringsheim³⁰ à la fin du 19^{ème} siècle.

²⁷ L'émittance est définie comme la puissance émise par unité de surface à une longueur d'onde donnée.

²⁸ Oto Richard Lummer (1860-1925)

²⁹ Ferdinand Kurlbaum (1857-1927)

³⁰ Ernst Pringsheim (1859-1917)

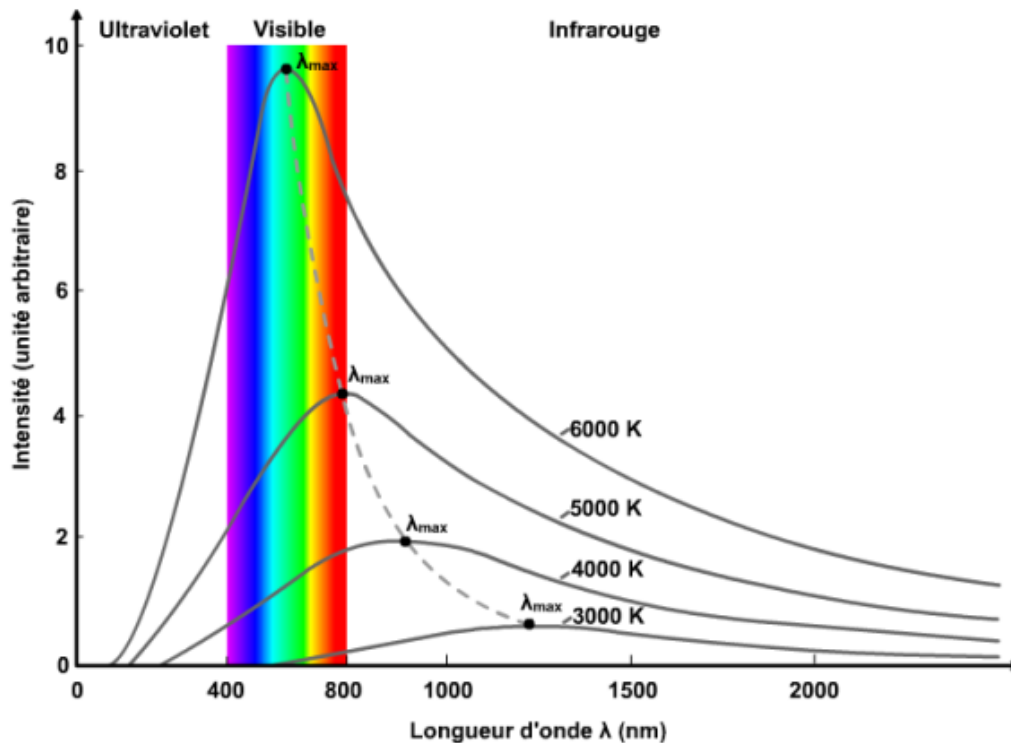


Figure 11 - Distribution spectrale du corps noir (ordonnée : émittance en unité arbitraire)

Les mesures montrèrent que la répartition spectrale ne dépend ni de la forme ni de la matière constituant les parois du four et qu'elle est une fonction universelle de la température et de la longueur d'onde.

Ce caractère universel tend à imposer l'implication exclusive de processus élémentaires ne dépendant que de constantes fondamentales de la physique.

En 1894, Wien a montré que la valeur de λ qui rend maximale $R(\lambda, T)$ varie comme l'inverse de T suivant la loi du déplacement de Wien (1894) :

$$\lambda_{max} = \frac{b}{T} = \frac{hc}{4,9651 kT}$$

où $b = 2.898 \times 10^{-3} mK$ est la constante de déplacement de Wien, $h = 6.6 \times 10^{-34} Js$ est la constante de Planck et $k = 1.3806 \times 10^{-23} K^{-1}$ la constante de Boltzmann.

Cela signifie que l'émission se fait vers des longueurs d'onde de plus en plus courtes lorsque la température augmente.

La théorie classique, basée sur l'énergie émise et absorbée de manière continue par les parois en équilibre thermiques fut impuissante à obtenir une formule en bon accord avec les mesures expérimentales sans cesse plus précises.

Cependant, Max Planck³¹ réussit en le 14 décembre 1900 dans un mémoire intitulé *Sur la théorie de la loi de la distribution d'énergie sur un spectre normal* à obtenir une formulation théorique convenable en faisant l'hypothèse des quanta selon laquelle l'énergie n'est pas émise (ou absorbée) de manière continue par la matière, mais par paquets de quantité d'énergie E dépendant de la longueur d'onde :

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

³¹ Max Planck (1858 – 1947) prix Nobel de Physique en 1918.

où $h = 6.6 \times 10^{-34} \text{ Js}$ est la constante de Planck.

On peut enfin souligner que l'hypothèse de Planck ne portait pas sur la nature de l'énergie électromagnétique mais uniquement sur son comportement lors de l'émission ou de l'absorption par la matière sous forme de quanta d'énergie électromagnétique.

L'étude de l'effet photoélectrique (faite en TD) a conduit Einstein (en 1905) à faire l'hypothèse que les propriétés de quantification énoncée par Planck sont inhérentes à la nature même du rayonnement électromagnétique. **Ainsi l'énergie lumineuse est émise, se propage et est absorbée sous forme de « grains » d'énergie appelés photons.** La lumière est donc constituée de quanta (ou atome de lumière), les photons, d'énergie $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$, de vitesse dans le vide $c = 310^8 \text{ ms}^{-1}$ et de masse nulle au repos.

L'expérience de l'effet Compton (étudiée en TD) confirme l'hypothèse des quanta de lumière.

III.7 La matière comme source de lumière

III.7.1 De Thomson à Rutherford

A la fin du 19^{ème} siècle, deux modèles d'atome avaient la faveur des scientifiques. Le modèle de Jean Perrin assimile l'atome à un système solaire miniature (modèle planétaire). La matière chargée positivement est confinée de façon quasi ponctuelle (10^{-15} m) au centre de l'atome. Les électrons gravitent autour et sont soumis à la force électrostatique qui leur donne une trajectoire elliptique. Le modèle de Thomson³² (1898) connu sous le nom de "plum pudding" ou "pancake" assimilait l'atome à une sphère de rayon de l'ordre du 10^{ème} de nanomètre dans laquelle des électrons chargés négativement et des particules plus massives chargées positivement étaient distribués quasi uniformément de telle manière que les charges positives et négatives étaient en nombres égaux afin d'assurer la neutralité électrique de l'atome.

En 1908, Rutherford³³ tente de mesurer la distribution de la charge positive à l'intérieur de la sphère de Rutherford sur l'idée que le meilleur moyen de trouver ce qu'il y a à l'intérieur du pudding était de mettre le doigt dedans. Ainsi il bombarda des feuilles d'or (épaisseur 400 nm) de particules α ³⁴ d'énergie de l'ordre du MeV (10^6 eV) (noyau d'hélium ${}^4\text{He}^{2+}$ ³⁵ composé de 2 protons et de 2 neutrons chargé $+2|e|$) émise par une source radioactive de radon. Un détecteur à scintillation³⁶ permet de dénombrer les particules α déviées dans une direction θ par rapport à leur direction incidente.

Selon le modèle de Thomson, la déviation des particules α aurait dû être faible compte tenu de la répartition spatiale diffuse et étendue de la charge positive. Cependant, l'observation montra que la plus grande partie des projectiles traversaient la cible en ligne droite et que le restant subissait de très forte déviation. L'interprétation de ce résultat suggérait que la partie massique positive n'était pas répartie dans une sphère de rayon de l'ordre de l'angström mais était confinée dans un volume beaucoup plus petit de l'ordre 10^{-13} cm . Rutherford révisa le modèle de Thomson et conforta le modèle planétaire de Perrin.

³² Joseph John Thomson (1856 -1940)

³³ Ernest Rutherford (1871-1937)

³⁴ La désintégration α spontanée de radio-isotopes en noyaux atomiques stables est donnée par : ${}_Z^AX \rightarrow {}_Z^{A-4}Y + {}_2^4\text{He}$

³⁵ A : nombre de nucléons (protons et de neutrons) dans le noyau ; Z : numéro atomique donnant le nombre de protons.

³⁶ Principe : les scintillateurs sont des milieux (solvant, molécules) dans lesquels une fraction non négligeable de l'énergie absorbée d'un rayonnement ionisant (photon ou particule chargée) est transformée, par luminescence (fluorescence), en photons susceptibles d'être détectés par un photomultiplicateur. Cette détection consiste à les convertir en un signal électrique qui peut être traité par une électronique appropriée.

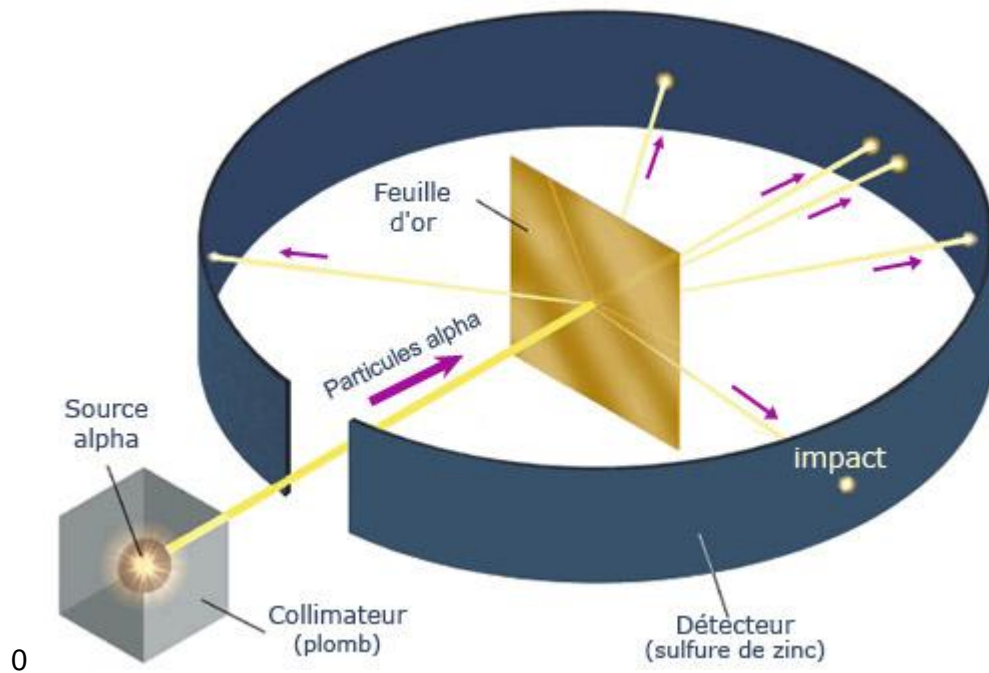


Figure 12 –Expérience de Rutherford

Ainsi, dans le modèle de Rutherford l'électron décrit des trajectoires circulaires ou elliptiques. Rutherford associa à chaque raie du spectre de l'atome d'hydrogène une orbite à l'électron.

Les électrons sont donc soumis à une accélération radiale dirigée vers le noyau. L'électromagnétisme prévoit que les électrons devraient émettre des radiations électromagnétiques caractéristiques des orbites dans lesquelles ils se trouvent (formule de Larmor – 1897). En émettant ces radiations, les électrons perdent au fur et à mesure de l'énergie cinétique. Il s'ensuivrait une « chute » inéluctable sur le noyau. Par ailleurs, la fréquence du rayonnement électromagnétique émis par un électron est inversement proportionnelle à la période de révolution de celui-ci. Ils devraient donc émettre un spectre continu se perdant dans les confins de l'ultraviolet. Ainsi tous les atomes devraient être instables et émettre un spectre continu.

Le modèle de Rutherford n'expliquait en rien pourquoi les électrons empruntaient certaines orbites sans en changer.

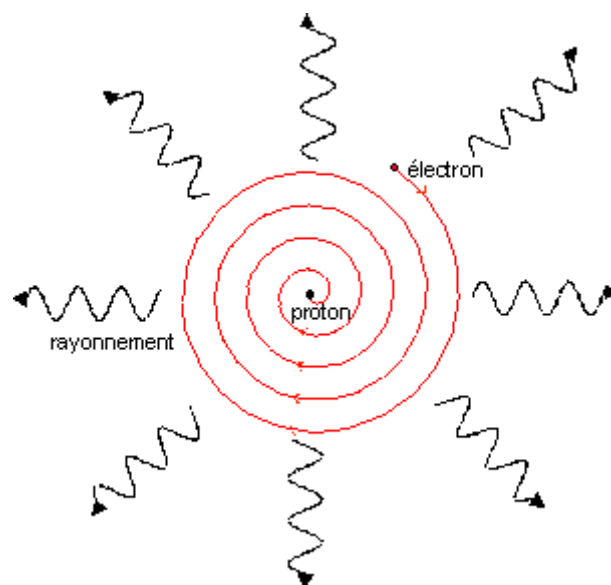


Figure 13 -Rayonnement de l'électron sur l'orbite de Rutherford

III.7.2 Le modèle de Bohr

A la fin du 19^{ème} siècle, il était observé que les atomes absorbent et émettent de la lumière à certaines longueurs d'onde bien définies. En 1885, J. Balmer a trouvé qu'une série de longueurs d'onde émises par l'atome d'hydrogène était bien reproduite par la formule empirique :

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5 \dots$$

où $R = 1,097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ est la constante de Rydberg.

Cette formule est restée sans le moindre fondement théorique pendant près de 30 ans.

Pour rendre compte de la stabilité de l'atome dont le modèle de Rutherford ne pouvait rendre compte, Bohr³⁷ a formulé l'hypothèse qu'un atome, conformément au modèle de Jean Perrin, repose sur un modèle planétaire où il existe des orbites stables (mouvement circulaire uniforme décrit par l'électron), c'est-à-dire telles que l'électron ne rayonne pas lorsqu'il s'y trouve. Ces orbites correspondent à des énergies bien définies et Bohr a supposé que lorsque l'électron passe d'une orbite à une autre il émet ou absorbe une fréquence telle que :

$$h\nu = \pm (E_f - E_i) \quad + \text{absorption} - : \text{émission}$$

Pour déterminer les fréquences possibles il faut imposer une condition de quantification du moment angulaire qui définit les orbites circulaires permises :

$$(25) \quad L = mvr = n\hbar$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ et L est le module du moment angulaire ou moment cinétique classique donné par :

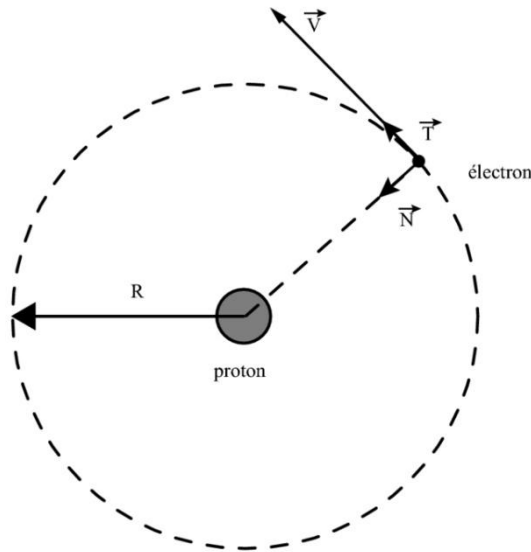
$$(26) \quad \vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$$

où \vec{r} est le vecteur position de l'électron, m la masse de l'électron et \vec{p} son impulsion.

Le moment angulaire est la grandeur physique qui joue un rôle analogue à la quantité de mouvement dans le cas des rotations. **Il dépend du choix de l'origine.** Si un système est constitué de plusieurs particules, le moment angulaire total est obtenu en additionnant ou en intégrant le moment angulaire de chacun de ses constituants.

A l'exception de ces hypothèses, Bohr a supposé que les lois de la physique classique étaient applicables à l'échelle atomique.

³⁷ Niels Bohr (1885 - 1902) physicien danois



On définit le repère de Frenet formé par les vecteurs \vec{N} et \vec{T} et on se place dans le référentiel supposé galiléen attaché au noyau supposé fixe en raison du rapport de masse entre le noyau et l'électron.

En supposant que la loi de Coulomb et la force de gravitation sont valides à l'échelle atomique, l'électron est soumis à la force de Coulomb centripète \vec{F}_c et à l'attraction gravitationnelle exercée par le proton sur l'électron ($\vec{F}_G = G \frac{M_G m_e}{r^2} \vec{N}$ où $G = 6,6742 \times 10^{-11} \text{ N m}^2 \text{ kg}^{-2}$) que l'on néglige devant \vec{F}_c .

La force de Coulomb s'exerçant entre le proton et l'électron assimilés à deux charges ponctuelles s'écrit donc :

$$(27) \quad \vec{F}_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \vec{N}$$

On applique la deuxième loi de Newton dans le référentiel du noyau :

$$(28) \quad m\vec{a} = \vec{F}_c$$

Le mouvement étant circulaire uniforme ($\frac{dv}{dt} = 0$), l'accélération est centripète : $\vec{a}_N = \frac{v^2}{r} \vec{N}$.

On en déduit donc à partir de (28):

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

soit :

$$mv^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

En tenant compte de la condition de quantification, on obtient :

$$v_n = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar n}$$

L'expression ci-dessus donne les vitesses tangentielles possibles sur les orbites stables de l'atome de Bohr.

Les rayons des orbites de Bohr sont donnés :

$$r_n = \frac{1}{m} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 v_n^2} = \frac{1}{m} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \hbar^2 n^2$$

soit $r_n = a_0 n^2$ avec $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0}{me^2} \hbar^2 = 0,53 \cdot 10^{-10} m$ le rayon de Bohr

A partir des expressions des vitesses et des rayons des orbites stables il est facile de trouver les énergies permises. En effet, l'énergie totale de l'électron est³⁸ :

$$E = \frac{1}{2} m v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Soit sur l'orbite n :

$$E_n = -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \frac{1}{n^2}$$

Remarquons que l'énergie cinétique est deux fois plus petite (en valeur absolue) que l'énergie potentielle.

Si l'électron passe de l'orbite n à l'orbite n' en émettant de la lumière, la fréquence émise est donnée par :

$$(29) \quad h\nu = \frac{hc}{\lambda} = E_n - E_{n'} = -\frac{m}{2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

De l'équation (29), on peut en déduire l'expression de la constante de Rydberg :

$$(30) \quad R = \frac{m}{2hc} \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} = \frac{me^4}{2hc(2\epsilon_0 \hbar)^2} = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}$$

³⁸ La force électrostatique est une force conservative. Agissant sur une particule, une force \vec{F} produit un travail lorsque la particule se déplace d'un point a à un point b : $W_{a \rightarrow b} = \int_a^b \vec{F} \cdot d\vec{l}$ où $d\vec{l}$ est le déplacement élémentaire. La force étant conservative on a $W_{a \rightarrow b} = -(U_b - U_a)$ où U est l'énergie potentielle associée à \vec{F} . Le calcul du travail de la force électrostatique s'exerçant sur une charge test q_b du fait du champ électrique produit par une charge q_a lors d'un déplacement radial conduit à l'énergie potentielle électrostatique $U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_a q_b}{r}$ d'interaction électrostatique entre deux charges ponctuelles q_a et q_b séparées de r .

IV LES FONDEMENTS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

IV.1 Evidence expérimentale de l'incompatibilité de certaines grandeurs

On peut montrer qu'il est impossible de mesurer avec précision pour un corpuscule tel que l'électron à la fois sa position et son impulsion. Cherchons à mesurer simultanément $y = 0$ et $p_y = 0$.

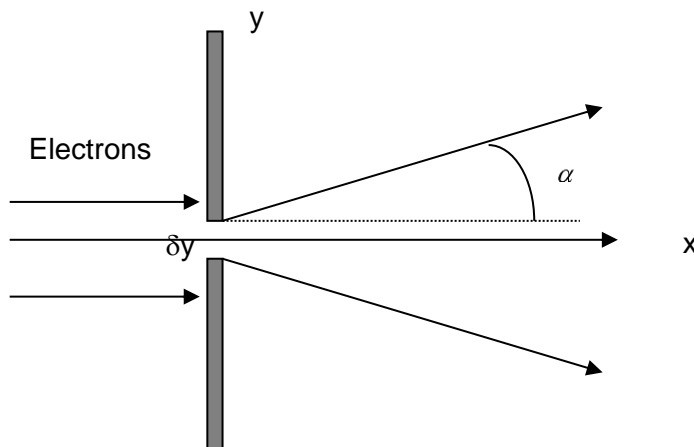


Figure 14 - Diffraction des électrons par une fente

On interpose sur le trajet d'un faisceau d'électrons une fente afin de sélectionner les électrons ayant une ordonnée y nulle. La précision est liée à la largeur de la fente δy . Les électrons triés ont donc une ordonnée comprise entre $-\delta y/2$ et $\delta y/2$.

Cependant si on observe le faisceau d'électrons qui a traversé la fente, nous mesurons que l'homogénéité de la direction des vitesses ($v_y = 0$ avant la fente) a été détruite par le fait d'obliger les électrons à passer par la fente. Le faisceau issu de la fente a subi un étalement de la distribution angulaire des trajectoires dans un angle α dont la mesure expérimentale donne $\lambda/\delta y$ à la condition d'associer à l'électron une longueur d'onde λ que l'expérience montre égale à :

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

où p est le module de la quantité de mouvement de l'électron \vec{p} et h la constante de Planck.

Ce phénomène est appelé un phénomène de **diffraction** auquel la physique classique n'apporte aucune réponse.

L'hypothèse que cette diffraction serait inhérente à l'action des bords de la fente sur la trajectoire des électrons pourrait être examinée si cette diffraction demeurerait la même quel que soit la largeur de la fente. Tel n'est pas le cas. En effet, on observe que la diffraction devient plus faible lorsque l'on augmente la largeur de la fente.

Ainsi, la fixation de y à δy près introduit donc nécessairement une incertitude δp_y sur la composante p_y de sa quantité de mouvement après traversée de la fente :

$$\delta p_y = p \sin \alpha \cong p \alpha \cong p \frac{\lambda}{\delta y} = \frac{h}{\delta y}$$

L'incertitude δp_y étant inversement proportionnelle à δy , il est impossible de fixer simultanément avec une parfaite précision des valeurs aux grandeurs y et p_y .

IV.2 Dualité onde-corpuscule

Les interprétations des expériences de Compton et de l'effet photoélectrique suffisent-elles pour rejeter définitivement la théorie ondulatoire électromagnétique de la lumière ?

Faut-il rejeter définitivement la théorie ondulatoire et en revenir à la théorie corpusculaire aux prix de raffinements tentant d'expliquer la diffraction des électrons par une fente ?

La réponse est bien évidemment non. On verra que les aspects ondulatoires et corpusculaires sont indissolublement liés pour rendre compte de nombreux faits expérimentaux. On parle alors de dualité onde corpuscule afin d'exprimer que les objets microscopiques possèdent de façon intrinsèque des propriétés qui les assimilent à la fois à des ondes et à des corpuscules matériels.

En 1924 De Broglie a émis l'hypothèse que cette dualité est une caractéristique de tous les objets microscopiques considérés comme des particules.

La formule donnant la longueur d'onde dite de De Broglie fonction de l'impulsion :

$$(31) \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

est supposée être applicable selon De Broglie pour toute particule quel que soit leur masse à condition de prendre $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$ si la particule est relativiste où γ est le facteur de Lorentz $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$.

(31) est donnée souvent sous une forme équivalente :

$$p = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \hbar k$$

L'énergie cinétique d'une particule non relativiste étant donnée par : $E_{cin} = \frac{p^2}{2m}$

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

conduit :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{cin}}}$$

IV.3 Annexe : dualité onde-corpuscule

Nous verrons, par un cheminement simplifié, comment il a pu associer une longueur d'onde à toute particule.

Revenons au cas des photons. Examinons de quelle manière l'hypothèse de l'existence du corpuscule de lumière par essence de nature relativiste concilie la relation de Planck-Einstein avec celle obtenue par Einstein dans son traité sur la relativité restreinte reliant l'énergie totale E d'une particule à l'impulsion \vec{p} et sa masse m_0 (masse au repos ou propre).

La formule relativiste reliant l'énergie et l'impulsion d'une particule s'écrit :

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4$$

où m_0 est la masse de la particule au repos, $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$ avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ et $\beta = \frac{v}{c}$

On a donc :

$$E = h\nu = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4}$$

La fréquence de l'onde pouvant être rendue arbitrairement aussi petite qu'on le souhaite, on obtient à la limite de la fréquence nulle :

$$0 \approx \left(\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \right)_{\nu \approx 0}$$

La formule ci-dessus est vérifiée si et seulement si les deux termes sous la racine sont nuls, ceci entraînant que la masse du photon est nulle : $m_0 = 0$. Cette propriété est vraie quel que soit la fréquence.

Dans ce cas, on a alors

$$E = pc$$

En utilisant la relation de Planck-Einstein $E = h\nu$, on peut ainsi lier l'aspect ondulatoire (la fréquence) et l'aspect corpusculaire (quantité de mouvement) :

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

c'est-à-dire :

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

On retrouve la relation expérimentale obtenue dans l'expérience de diffraction des électrons.

Cette relation a été vérifiée dans le cas des photons par l'effet Compton. **De Broglie a supposé qu'elle était vraie pour toute particule quel que soit leur masse à condition de prendre $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$.** On l'écrit souvent sous la forme équivalente :

$$p = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda}$$

c'est-à-dire :

$$p = \hbar k \text{ et plus généralement } \vec{p} = \hbar \vec{k}$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$. L'impulsion est donc proportionnelle au vecteur d'onde.

Nous allons chercher à exprimer la longueur d'onde en fonction de l'énergie cinétique de la particule. Lorsque la particule est au repos son impulsion est nulle et son énergie est :

$$E_0 = mc^2$$

Lorsqu'elle est en mouvement son énergie est augmentée d'une quantité qui est par définition son énergie cinétique E_{cin} .

On a donc :

$$E = E_0 + E_{cin}$$

En élevant au carré il vient :

$$E^2 = E_0^2 + E_{cin}^2 + 2E_0E_{cin}$$

D'après la formulation relativiste de l'énergie $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$, on a :

$$p^2c^2 = E_{cin}^2 + 2E_0E_{cin}$$

soit :

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E_{cin}^2 + 2E_0E_{cin}}$$

ou encore :

$$p = \frac{E_0}{c} \sqrt{\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)^2 + 2\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)}$$

La longueur d'onde s'écrit donc :

$$\lambda = \frac{hc}{E_0} \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)^2 + 2\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)}} = \frac{\lambda_c}{\sqrt{\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)^2 + 2\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)}}$$

où $\lambda_c = \frac{h}{mc}$ est la longueur d'onde Compton de la particule.

Dans l'approximation non relativiste, on a $E_{cin} \ll E_0$ et on peut écrire :

$$\lambda = \frac{\lambda_c}{\sqrt{2\left(\frac{E_{cin}}{E_0}\right)}}$$

L'énergie cinétique étant donnée par : $E_{cin} = \frac{p^2}{2m}$

et on retrouve bien :

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

ou :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE_{cin}}}$$

IV.4 Vérifications expérimentales

IV.4.1 Diffraction des électrons

De Broglie a prédit qu'il était possible de mettre en évidence l'onde associée à des électrons en mettant en évidence leur diffraction par un cristal à la manière de l'expérience de diffraction des rayons X³⁹ par un cristal de Friedrich⁴⁰ et Knipping⁴¹.

En 1924, Davisson et Germer réalisèrent une expérience de diffraction d'électrons par un cristal de Nickel :

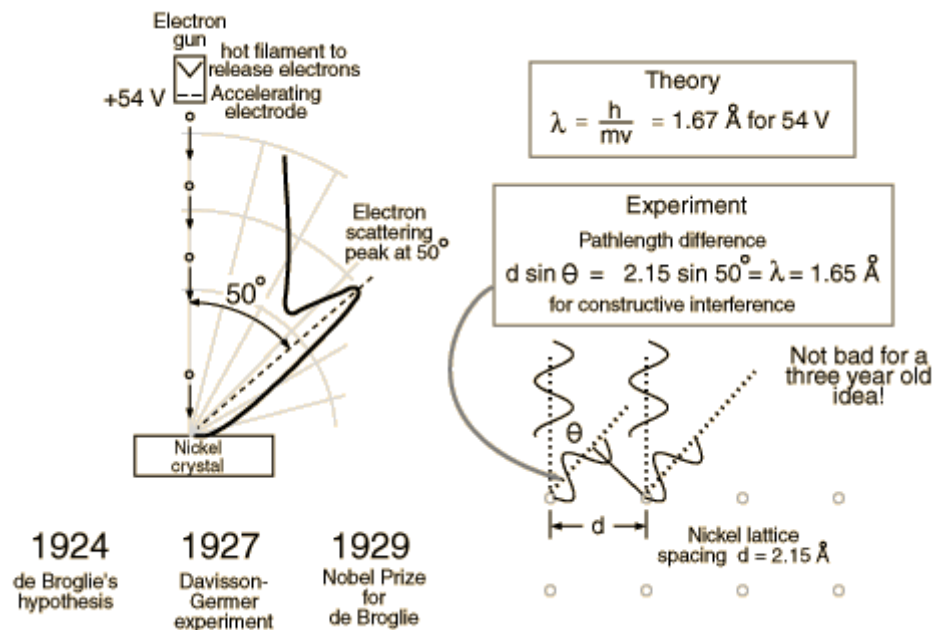
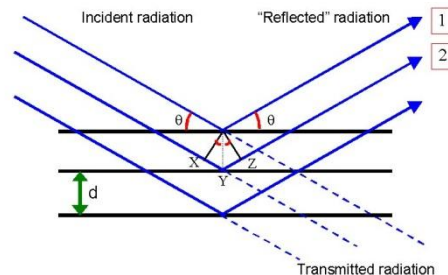


Figure 15 - Expérience de Davisson et Germer

La relation de Bragg démontrée dans le cas de la diffraction des rayons X est la même pour les électrons :

$$2d \sin \theta = n\lambda$$



En déplaçant l'électrode collectrice, Davisson et Germer mesure que les intensités maximales du courant mesuré avaient lieu pour des angles θ vérifiant la relation de Bragg à la condition de prendre pour longueur d'onde λ la longueur d'onde de De Broglie associée aux électrons :

³⁹ Les rayons X sont des radiations électromagnétiques très énergétiques (0.5 à 30 KeV). Ils peuvent être produits par ionisation en couche interne d'un atome. Le trou est comblé par un électron provenant d'une couche externe avec émission d'un photon X. Ils peuvent être également produit par l'accélération (freinage) des électrons sur une cible dans un tube à rayons X : les électrons sont extraits d'une cathode de [C:\wiki\Tungst%C3%A8ne](https://fr.wikipedia.org/wiki/Tungst%C3%A8ne) tungstène chauffée, accélérés par une tension électrique dans un tube sous vide, ce faisceau sert à bombarder une cible métallique (appelée anode ou anti-cathode) ; le ralentissement des électrons par les atomes de la cible provoque un rayonnement continu de freinage

⁴⁰ Walter Friedrich ()

⁴¹ Paul Knipping ()

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$$

IV.4.2 Propriétés ondulatoires de la matière : autres aspects

La diffraction des électrons par un métal requiert pour être observée que la longueur d'onde de De Broglie soit de l'ordre de grandeur des distances entre les atomes dans le cristal.

Le microscope électronique constitue une application intéressante des caractéristiques ondulatoires de l'électron. On sait que le pouvoir séparateur est lié à la longueur d'onde. En accélérant les électrons à quelques dizaines de keV leur longueur d'onde devient très courte (10^{-11} à 10^{-12} m) ce qui permet d'atteindre un très bon pouvoir séparateur.

Le neutron possédant une masse de l'ordre de 1800 fois celle des électrons peut-il manifester une propriété ondulatoire comme l'a supposé De Broglie ?

Aux énergies thermiques (quelques centièmes d'eV) les neutrons ont des longueurs d'onde de l'ordre de 1 \AA ce qui permet de les utiliser dans l'étude de la structure cristalline. Contrairement aux atomes neutres ils sont très pénétrants car ils n'interagissent pratiquement pas avec les électrons. Ils sont essentiellement diffusés par les noyaux. Ils ne fournissent cependant aucune information sur la structure nucléaire car la longueur d'onde associée est beaucoup plus grande que le rayon nucléaire. Pour étudier la structure nucléaire il faut des longueurs d'onde comparables aux dimensions nucléaires. Pour cela l'énergie des neutrons doit atteindre quelques MeV. Des expériences de diffraction des neutrons permettent à nouveau de vérifier la relation de De Broglie.

Les particules possédant cette dualité onde et corpuscule sont souvent désignées de **quantons** ou particules quantiques.

IV.5 Notions de paquets d'onde

Dans un milieu homogène et isotrope, le type le plus simple d'onde est l'onde monochromatique dont la représentation complexe est donnée :

$$e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

représentant une vibration de longueur d'onde $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ se propageant dans la direction de son vecteur d'onde \vec{k} à la vitesse constante. La vitesse de propagation est la vitesse de phase.

ω est indépendante de la direction de \vec{k} (milieu isotrope) mais peut dépendre éventuellement du module de ce vecteur.

On associe l'onde ci-dessus à un mouvement rectiligne uniforme d'énergie $E = \hbar\omega$ dirigée parallèlement à \vec{k} .

Comme toute onde peut être considérée comme une superposition d'ondes planes monochromatiques, la connaissance de la loi de dispersion $\omega(k)$ suffit à déterminer le comportement de n'importe quelle onde au cours du temps.

Considérons le cas particulier d'une onde plane monochromatique se propageant dans le sens positif de l'axe Ox. Elle est représentée par la fonction :

$$(32) \quad \Psi_0(x, t) = A_0 \cos(k_0 x - \omega_0 t)$$

D'après la formule de De Broglie elle est associée à une particule d'impulsion bien définie $p_0 = \hbar k_0$ et d'énergie bien définie $E_0 = \hbar \omega_0$.

L'onde plane (32) ne peut pas représenter une particule **localisée dans une région de l'espace d'extension finie** car son extension spatiale est infinie comme toute fonction sinusoïdale.

C'est la raison pour laquelle, il est nécessaire pour représenter le comportement ondulatoire d'une particule localisée à un instant dans une portion de l'espace de construire une superposition d'ondes planes qui interfèrent de manière constructive dans une région limitée de l'espace (où se trouve la particule) et de façon destructive ailleurs. Cette idée est le fondement de la notion de **paquet d'ondes**.

Pour une particule libre non relativiste l'énergie purement cinétique est donnée par :

$$E_0 = \frac{p_0^2}{2m}$$

On en déduit la relation de dispersion :

$$(33) \quad \omega_0 = \frac{E_0}{\hbar} = \frac{p_0^2}{2m\hbar} = \frac{\hbar k_0^2}{2m}$$

La vitesse de phase est donc :

$$v_\varphi = \frac{\omega_0}{k_0} = \frac{\hbar k_0}{2m}$$

Pour construire une fonction qui ne possède de valeurs appréciables que dans une région limitée de l'espace, il faut superposer des ondes ayant différentes valeurs de k et de ω .

Considérons une fonction de la forme :

$$\Psi(x, t) = \sum_S A_S \cos(k_S x - \omega_S t)$$

où les amplitudes A_S mesurent l'importance relative des différentes ondes superposées. On peut en principe choisir les A_S de manière à produire une fonction $\Psi(x, t)$ qui n'a des valeurs importantes que dans une région localisée de l'espace.

Supposons qu'à $t = 0$, $\Psi(x, 0)$ est la superposition de trois ondes telles que :

$$k_1 = k_0 - \frac{\Delta k}{2}, k_2 = k_0, k_3 = k_0 + \frac{\Delta k}{2}, A_1 = A_3 = \frac{A_0}{2} \text{ et } A_2 = A_0$$

De plus, nous supposons que $\Delta k \ll k_0$, c'est-à-dire que la dispersion des valeurs de k est petite par rapport à la moyenne k_0 .

On a donc :

$$\Psi(x, 0) = A_0 \left[\frac{1}{2} \cos \left(x \left(k_0 - \frac{\Delta k}{2} \right) \right) + \cos(k_0 x) + \frac{1}{2} \cos \left(x \left(k_0 + \frac{\Delta k}{2} \right) \right) \right]$$

d'où :

$$\Psi(x, 0) = A_0 \left[1 + \cos \left(\frac{\Delta k}{2} x \right) \right] \cos(k_0 x)$$

soit :

$$\Psi(x, 0) = 2A_0 \cos^2 \left(\frac{\Delta k}{4} x \right) \cos(k_0 x)$$

On a donc une fonction qui oscille très rapidement $\cos(k_0 x)$ et dont l'amplitude est modulée par une autre fonction dont l'oscillation est beaucoup plus lente. L'amplitude oscille entre les valeurs 0 et $2A_0$ et elle atteint son maximum en $x = 0$ à $t = 0$.

```
# -*- coding: utf-8 -*-  
import numpy as np  
import math
```

```
import matplotlib.pyplot as plt

def paquet(x, k0, delta_k, A0):
    """
    paquet d'ondes
    """
    return (2 * A0 * np.cos(k0 * x) * np.cos(delta_k * x / 4.))**2

# script principal
# donnees
A0 = 10.
deltak = 3
k0 = 30.
nbPeriodes = 4
npPointsParPeriode = 100

# discretisation abscisses
nbPointsDiscret = int(nbPeriodes * npPointsParPeriode * 4 * math.pi // deltak)
x = np.linspace(- nbPeriodes * 4 * math.pi / deltak / 2, nbPeriodes * 4 * math.pi / deltak / 2, nbPointsDiscret + 1)
y = paquet(x, k0, deltak, A0)

# Premieres annulations du cos()**2 pour phase = +/- pi / 2
xnulNeg = - 2 * math.pi / deltak
xnulPos = 2 * math.pi / deltak

plt.figure()
plt.plot(x, y, label = 'paquet d\'ondes')
plt.axvline(xnulNeg, color='gray', linestyle='--', label = '-2pi/deltak') # tracer droite verticale
plt.axvline(xnulPos, color='red', linestyle='--', label = '+2pi/deltak')
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('y')
plt.legend()
plt.savefig('paquet0.jpg', dpi=200)
plt.show()
```

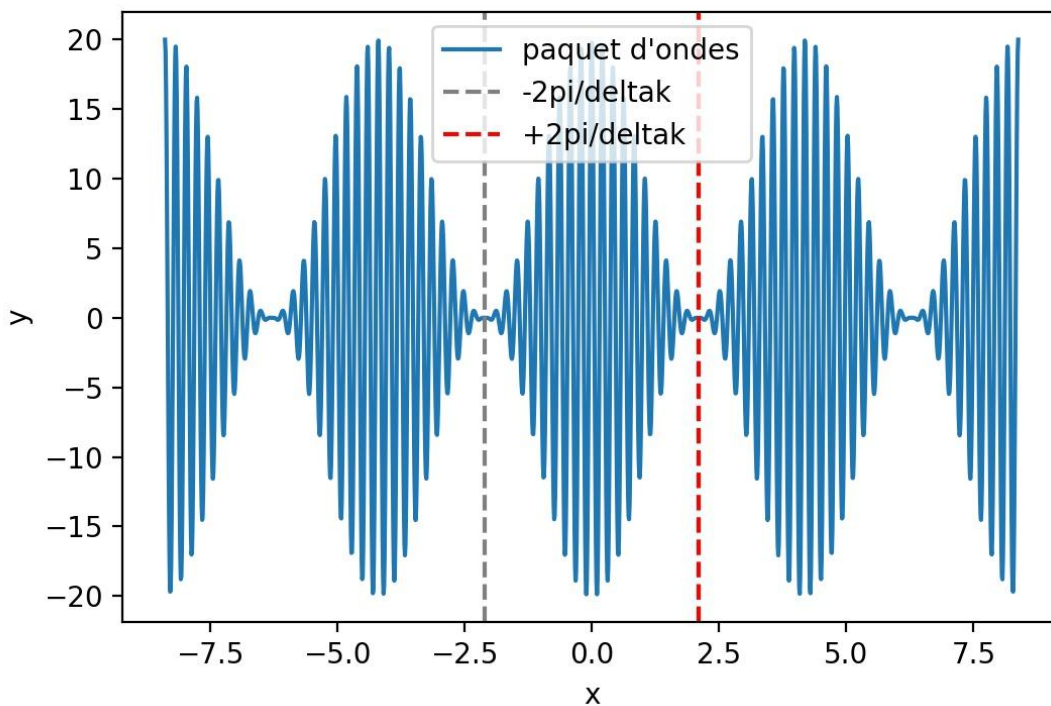


Figure 16

A $t = 0$, la fonction $\cos^2\left(\frac{\Delta k}{4}x\right)$ s'annule en :

$$x = \pm \frac{2\pi}{\Delta k}$$

La largeur spatiale de l'enveloppe est :

$$\Delta x = \frac{4\pi}{\Delta k}$$

alors que la largeur en impulsion est :

$$\Delta p = \hbar \Delta k$$

Le mouvement étant unidimensionnel selon l'axe Ox , le produit de ces deux grandeurs est donné par :

$$(34) \quad \Delta x \Delta p = \Delta x \Delta p_x = 4\pi\hbar$$

C'est donc une grandeur fondamentale indépendante des caractéristiques des ondes superposées. Ainsi pour construire une fonction bien localisée dans l'espace il faut superposer des ondes correspondant à une grande dispersion des impulsions. **Il est donc impossible de représenter une particule ayant une impulsion et une position bien définies simultanément.**

Le calcul simple effectué ici avec seulement trois ondes planes donne en fait une fonction périodique de x ; la particule possède donc une infinité d'images du lobe centrale comme le montre la Figure 16. En réalité il est possible de construire une fonction qui ne possède qu'une seule image (ou lobe de l'enveloppe) ou qui interfère de manière constructive dans une seule région de l'espace d'extension finie. Pour cela il est nécessaire de superposer un très grand nombre d'onde de valeurs de k très proches.

A la limite, la superposition forme un continuum de telle manière que la somme sur les différentes valeurs de k devient une intégrale. En représentation complexe on a :

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

où l'amplitude $A(k)$ peut être complexe.

On écrit, de manière équivalente :

$$(35) \quad \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} |A(k)| e^{i\alpha(k)} e^{i(kx - \omega t)} dk$$

On suppose que $|A(k)|$ possède des valeurs appréciables dans un intervalle Δk centré autour d'une valeur k_0 . L'intégrale (35) sera maximale en module à chaque instant lorsque les ondes d'amplitudes les plus grandes c'est-à-dire celles qui correspondent à k voisin de k_0 interféreront de manière constructive. Ceci se produit lorsque la phase de ces ondes qui dépend de k ne varie pratiquement pas autour de $k = k_0$. On écrit donc la condition de phase stationnaire :

$$\frac{d}{dk} (\alpha + kx - \omega t) = 0$$

c'est-à-dire :

$$\frac{d\alpha}{dk} + x - \frac{d\omega}{dk} t = 0$$

soit :

$$x = \frac{d\omega}{dk} t - \frac{d\alpha}{dk}$$

La relation ci-dessus est l'équation d'un mouvement uniforme à la vitesse :

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

Cette grandeur est appelée vitesse de groupe. Elle correspond précisément à la vitesse de déplacement du centre du paquet d'onde.

La quantité $-\frac{d\alpha}{dk}$ est indépendante du temps et joue le rôle de position initiale.

En utilisant la relation de dispersion (33), on trouve :

$$v_g = \frac{\hbar k}{m}$$

c'est-à-dire :

$$v_g = \frac{p}{m} = v$$

C'est donc la vitesse de groupe qui est associée à la vitesse de la particule.

Remarque

Chaque onde composant le paquet d'onde se déplace avec sa propre vitesse qui est la vitesse de phase puisque cette dernière dépend de la valeur de k . Ainsi l'évolution temporelle d'un paquet d'onde montre une propagation du paquet subissant une déformation de la forme du paquet. C'est la raison pour laquelle la relation qui donne ω en fonction de k s'appelle la relation de dispersion.

Il est donc possible de construire une fonction localisée dans l'espace mais à la condition d'accepter une certaine dispersion des vecteurs d'onde c'est-à-dire des impulsions. Or pour qu'une particule possède une trajectoire bien définie il faut qu'elle possède à chaque instant une position et une impulsion bien définies. Il semble donc impossible d'attribuer de telles grandeurs à une particule si on la représente à l'aide d'un paquet d'ondes.

On retrouve le constat fait dans le cas de la diffraction des électrons par une fente quant à l'incompatibilité de la grandeur position et impulsion.

IV.6 Mesures de la position et l'impulsion

Nous venons de voir, dans une tentative de réduire la réalité du monde physique à celle des ondes (paquet d'ondes) ou à celle des particules (diffraction des électrons par une fente), qu'il est impossible d'attribuer une position et une impulsion bien définies à une particule, et donc de lui attribuer une trajectoire.

Cette limitation constitue-elle un échec fatal pour cette démarche ?

Est-il possible de connaître la position et l'impulsion d'une particule avec une précision illimitée ? L'utilisation d'un diaphragme est sans doute la méthode la plus directe pour mesurer la position d'un électron. **Cependant, on peut également éclairer cet objet et observer sa position au travers d'un microscope.**

Heisenberg a fait une analyse critique de ce processus de mesure (*observer effect*) en s'intéressant à la mesure précise de la position d'un électron. L'expérience de pensée qu'il a proposée est connue sous le nom de microscope de Heisenberg. Nous allons la décrire ici.

Lorsqu'un objet macroscopique est éclairé, il n'est pas perturbé par l'impact des photons et on peut l'observer sans le déranger. Il n'en va pas de même d'un objet microscopique comme un électron par exemple

Ainsi si on éclaire un électron et que l'on observe les photons défléchis dans une lentille, on remonte à la connaissance de la position de l'électron. L'expérience de Compton a montré

qu'il subit un recul sous l'impact du photon. On perturbe donc l'électron en lui imposant un changement d'impulsion. Or pour obtenir une bonne résolution spatiale il faut utiliser une longueur d'onde courte c'est-à-dire des photons de grande impulsion. La perturbation que subit l'électron est alors plus grande. Si l'on souhaitait mesurer de manière subséquente l'impulsion de l'électron, il faudrait évaluer la perturbation provoquée par la mesure qui relève du processus de mesure. **On peut évaluer une telle perturbation en mesurant le changement d'impulsion du photon.** On mesure donc l'impulsion finale du photon en supposant que la seule source d'imprécision provient de cette mesure.

Considérons un électron éclairé par un faisceau de lumière (pas nécessairement visible pour l'œil humain). L'observation, à l'aide d'un microscope, d'un photon diffusé par l'électron permet d'obtenir une information sur sa position (**Figure 17**). Or la précision obtenue sur la mesure de la position est limitée par le pouvoir séparateur du microscope. Puisque celui-ci ne peut pas donner des images distinctes de deux points dont la différence d'ordonnées est inférieure à :

$$\delta = \frac{\lambda}{2 \sin(\theta/2)}$$

l'incertitude sur l'ordonnée de l'électron est de l'ordre de $\Delta y = \delta$.

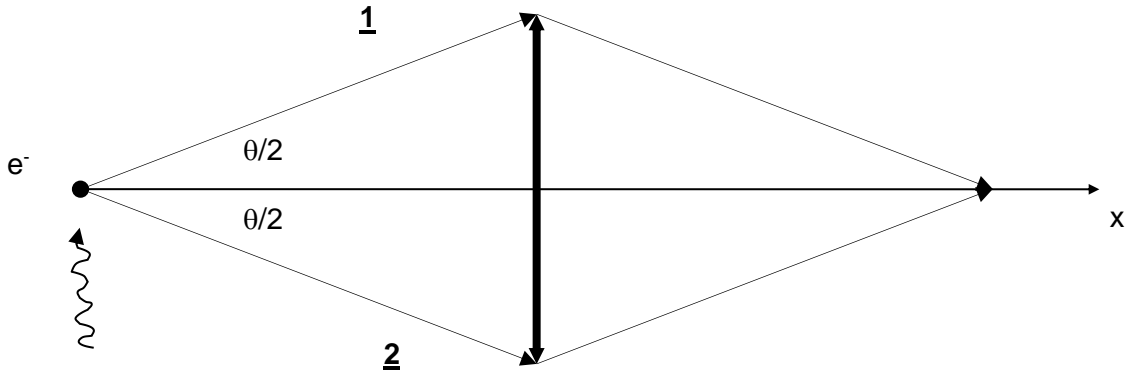


Figure 17 - Principe du microscope d'Heisenberg

On suppose que l'impulsion initiale du photon \vec{p} est connue avec une précision illimitée. L'observateur ou instrument qui reçoit le photon sait uniquement que celui-ci a traversé la lentille mais il ignore par quel endroit il est passé.

Evaluons l'impulsion transférée par le photon à l'électron. Avant la collision, nous supposons que l'électron est au repos $\vec{p}^e = \vec{0}$ en $y = 0$. L'impulsion du photon est supposée connue avec une précision illimitée. Sa direction est le long Oy est son module est $p = \frac{h}{\lambda}$. Après la collision, l'impulsion transférée à l'électron sur Oy est mv_y^e . Cette dernière est maximale lorsque la composante selon Oy de l'impulsion du photon est négative et que la direction de diffusion correspond à l'angle maximal autorisé par l'ouverture angulaire de la lentille (chemin 2). On a alors d'après la relation de conservation de l'impulsion totale pour le chemin 2:

$$\vec{p} + \vec{0} = \vec{p}' + \vec{p}^{e'}$$

On projette sur Oy en multipliant scalairement par le vecteur unitaire \vec{e}_y :

$$\frac{h}{\lambda} + 0 = -\frac{h}{\lambda'} \sin \frac{\theta}{2} + mv_y^{e'}$$

L'impulsion transférée est minimale lorsque la composante selon Oy du photon est positive (chemin 1) :

$$\frac{h}{\lambda} + 0 = \frac{h}{\lambda''} \sin \frac{\theta}{2} + mv_y^{e''}$$

Des équations précédentes, on peut tirer que l'impulsion suivant Oy de l'électron est comprise entre $p_y^{e''} = \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda''} \sin \frac{\theta}{2}$ et $p_y^{e'} = \frac{h}{\lambda} + \frac{h}{\lambda'} \sin \frac{\theta}{2}$

En supposant que $\lambda' \simeq \lambda$ et que $\lambda'' \simeq \lambda$, on en déduit que l'incertitude sur la composante suivant Oy de l'électron après la collision est :

$$\Delta p_y^e = \frac{h}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2} = p \sin \frac{\theta}{2}$$

L'utilisation d'une courte longueur d'onde et d'une grande ouverture angulaire pour la lentille conduit à une petite incertitude sur la position mais à une grande incertitude sur l'impulsion. Le produit des incertitudes est indépendant de la longueur d'onde et de l'ouverture de la lentille.

En effet, on a :

$$\Delta y \Delta p_y^e = \frac{h}{2}$$

Ce produit ne peut pas être rendu arbitrairement petit car il est proportionnel à une constante fondamentale de la physique. Nous avons obtenu en fait une limite inférieure pour le produit des incertitudes.

On peut donc écrire :

$$\Delta y \Delta p_y^e \geq \frac{h}{2}$$

La détermination de la trajectoire d'une particule implique la mesure simultanée de sa position et de sa vitesse (ou de son impulsion).

La relation précédente implique donc que la trajectoire des objets **microscopiques n'est pas mesurable**.

Ceci contredit le modèle de Bohr dans lequel le mouvement de l'électron décrit une orbite bien définie. Si ces trajectoires existaient vraiment, pour les observer, il faudrait utiliser des photons dont la longueur d'onde soit inférieure à 10^{-10} m (diamètre de l'atome d'hydrogène dans son état fondamental). De tels photons se trouvent dans la gamme des rayons X et leur énergie est supérieure à 12500 eV. Cette énergie est considérable par rapport à l'énergie de liaison de l'électron (13,6 eV). L'électron risquerait donc d'être éjecté de l'atome. Ces considérations montrent qu'il est impossible d'observer la trajectoire d'un électron dans un atome.

La trajectoire n'étant pas observable à l'échelle atomique d'après Heisenberg, il n'est pas nécessaire de construire une théorie dans laquelle cette notion est définie. En effet la physique doit fournir une réponse uniquement aux questions qui se posent en termes d'expériences.

IV.7 Interprétation des inégalités de Heisenberg

La position et l'impulsion d'une particule ne peuvent pas être connues simultanément avec une précision illimitée. En effet nous avons vu formule (34) que le produit $\Delta x \Delta p_x$ ne peut pas être rendu arbitrairement petit car il est proportionnel à une constante fondamentale de la physique. Nous avons obtenu en fait une limite inférieure pour le produit des incertitudes dont on peut donner une formulation plus générale appelé inégalité d'Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

La valeur précise de la limite n'a pas de sens tant qu'une définition précise de Δx et de Δp_x n'a pas été donnée. Cette limite est cependant toujours liée à la constante de Planck.

Question : l'inégalité de Heisenberg traduit-elle une incertitude (liée au processus de mesure) ou une indétermination ?

La première hypothèse suppose que la position et l'impulsion ont des valeurs bien définies dans la nature mais que les limitations liées au processus de mesure (*observer effect*) ou aux appareils de mesure nous empêchent de les connaître avec une précision illimitée.

La seconde hypothèse suppose au contraire que ces grandeurs ne sont pas bien définies dans la nature et qu'en conséquence il est impossible de les mesurer avec une précision illimitée. Nous allons adopter ce second point de vue et nous allons voir que les inégalités de Heisenberg nous permettent d'apprendre quelque chose sur le comportement des systèmes physiques.

La quantité Δx représente l'extension spatiale d'un objet microscopique tandis que Δp_x représente son extension en impulsion. Du point de vue d'une répartition statistique des résultats d'une mesure, ces valeurs sont assimilables à l'écart type ou écart quadratique moyen.

On aura donc : $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$ et $\Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$

Si la valeur moyenne est nulle il vient :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \text{ et } \Delta p_x = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$$

Ainsi les quantités Δx et Δp_x fournissent un ordre de grandeur ou une estimation de $|x|$ et de $|p_x|$. Si on note a l'extension spatiale, l'extension en impulsion s'écrit d'après la limite inférieure de l'inégalité d'Heisenberg :

$$\Delta p_x \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} = \frac{\hbar}{a}$$

C'est une valeur représentative de $|p_x|$.

IV.7.1 Effet tunnel

Nous allons terminer par un exemple qui présente un immense intérêt aussi bien pratique que théorique : l'effet tunnel.

Considérons le mouvement unidimensionnel d'une particule soumise à une interaction qui lui donne une énergie potentielle $V(x)$ (**Figure 18**). Supposons que son énergie totale soit inférieure à la valeur maximale de $V(x)$. En chaque point son énergie cinétique est donnée par :

$$E_{cin} = E - V(x)$$

D'après la théorie classique la particule ralentit lorsque l'énergie potentielle augmente et la région où $E < V_0$ est interdite car l'énergie cinétique ne peut pas être négative.

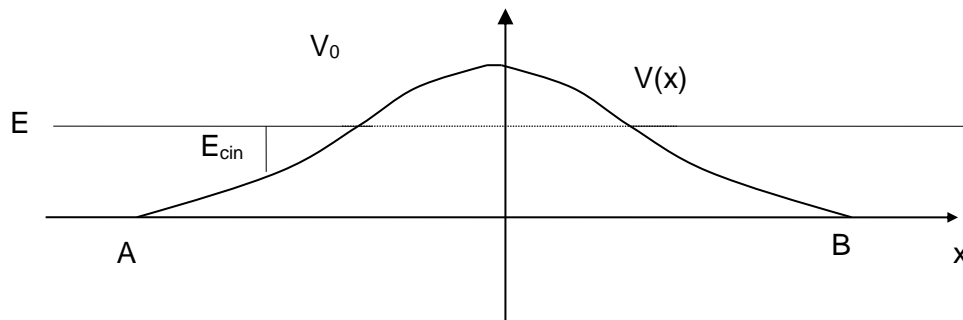


Figure 18 - Effet tunnel

D'après la théorie classique, si la particule se trouve d'un côté de la barrière à un instant donné elle y reste. En effet pour aller de A en B elle devrait passer par toutes les positions intermédiaires d'abscisses pour lesquelles l'énergie cinétique serait négative car la particule possède une trajectoire bien définie.

La relation d'indétermination de Heisenberg implique que la particule ne possède pas de trajectoire. Il ne lui serait donc pas interdit de faire la transition de A à B. En effet considérer cette transition n'implique pas que **son énergie cinétique puisse être considérée comme négative à un instant donné !** Pour pouvoir faire une telle affirmation, il faudrait mesurer sa position avec une précision nettement meilleure que la largeur de la barrière. Nous trouverions alors que la limitation de l'extension spatiale $\Delta x = a$ produirait une augmentation de l'impulsion (et donc de l'énergie cinétique) tellement grande qu'on ne pourrait pas affirmer que l'énergie totale serait inférieure à la hauteur de la barrière. En fait, il n'y a pas de contradiction entre la traversée de la barrière et la conservation de l'énergie parce que le concept de trajectoire (évolution continue dans l'espace-temps) n'a pas de sens.

Ce genre de phénomène se produit couramment dans les atomes, les molécules, les solides et les noyaux. Il a reçu le nom d'effet tunnel.

IV.8 - Limite de validité de la physique classique

Si les électrons passent à travers une fente de largeur d , l'expérience montre que les effets quantiques sont négligeables si $\lambda \ll d$. Il suffit de quelques dizaines d'eV pour qu'un électron ait une longueur d'onde de l'ordre de l'Angström, c'est-à-dire une distance très courte à l'échelle macroscopique. Cependant, lorsqu'il atteint un cristal ou une poudre c'est la distance inter atomique qui joue le rôle de distance caractéristique. Comme elle est de l'ordre de 1 Å, des effets quantiques se manifestent.

Reprenons en guise d'illustration l'expérience de diffraction des électrons par un diaphragme. La diffraction est négligeable si :

$$\frac{\delta p_y}{p_x} \ll 1$$

soit :

$$\delta p_y \ll p_x \simeq p$$

ou encore :

$$\frac{h}{\delta y} \ll \frac{h}{\lambda}$$

ce qui est toujours le cas si $\lambda \ll d$.

Pour conclure, on peut formuler le critère de validité de la mécanique classique à l'aide des inégalités de Heisenberg. Tant que la précision des mesures est telle que :

$$\Delta x \Delta p_x \gg \hbar, \Delta y \Delta p_y \gg \hbar \text{ et } \Delta z \Delta p_z \gg \hbar$$

les effets quantiques ne se manifestent pas dans l'expérience.

V PROBABILITES ET AMPLITUDES QUANTIQUES

V.1 Introduction

Nous avons vu que le concept de photon s'est imposé pour expliquer certains phénomènes impliquant des ondes électromagnétiques. Einstein a émis en 1905 l'idée selon laquelle la théorie électromagnétique de Maxwell n'est correcte que statistiquement, c'est-à-dire dans des situations faisant intervenir un grand nombre de photons. L'expérience confirme cette hypothèse aujourd'hui.

Les objets "quantiques" qui sont caractérisés par la dualité onde/corpuscule sont appelés "quants" pour ne pas favoriser un aspect par rapport à l'autre.

Nous commencerons l'élaboration d'un schéma théorique qui vise à interpréter les phénomènes impliquant des quants. Les lois énoncées s'appliqueront à tous les quants mais nous attacherons une importance particulière au photon.

Nous verrons que la notion de probabilité est indispensable. En effet les lois de la physique quantique sont fondamentalement probabilistes. La notion de probabilité est cependant insuffisante : le concept **d'amplitude de probabilité** est nécessaire pour expliquer l'interférence quantique. Les règles relatives au calcul des amplitudes et des probabilités jouent le rôle de postulats de la théorie quantique.

V.2 La notion de probabilité en physique quantique

Montrons que la notion de probabilité est indispensable à l'interprétation des phénomènes lumineux mais pas insuffisante.

V.2.1 Loi de Malus

Considérons une onde plane polarisée rectilignement (lumière monochromatique) incidente sur un polariseur rectiligne dont l'axe est selon la direction du vecteur unitaire \vec{a} . L'amplitude du champ électrique est E_0 et l'intensité est I_0 après la traversée du polariseur. Un second polariseur, identique au premier mais dont l'axe est suivant le vecteur unitaire \vec{b} est placé sur le chemin du faisceau transmis par le premier polariseur. L'amplitude transmise par le second polariseur est :

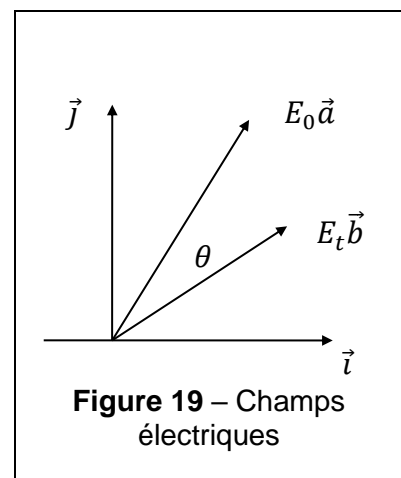
$$E_t = E_0 \vec{a} \cdot \vec{b} = E_0 \cos \theta$$

où θ est l'angle entre les axes des polariseurs (**Figure 19**).

L'intensité mesurée après le second polariseur est donnée par :

$$I_t = I_0 \cos^2 \theta$$

Cette relation est appelée loi de Malus.



Elle est en accord avec les prévisions de la théorie de Maxwell. Ainsi si l'intensité⁴² varie comme $\cos^2 \theta$ lorsqu'on tourne le deuxième polariseur⁴³, la fréquence de la lumière (et donc sa couleur) ne change pas.

Nous allons chercher une interprétation de la loi de Malus à l'aide du concept de photon. Chaque photon est porteur de l'énergie $\hbar\omega$.

Soit N le flux de photons (nombre de photons transportés par unité de temps et par unité de section du faisceau). L'intensité du faisceau incident c'est à dire le flux en énergie est :

$$I = N\hbar\omega$$

Puisque la proportion $\cos^2 \theta$ de l'énergie incidente sur le second polariseur est transmise on peut envisager deux hypothèses :

- 1° une proportion $\cos^2 \theta$ de chaque photon traverse le polariseur,
- 2° une proportion $\cos^2 \theta$ des photons est transmise intégralement.

L'hypothèse 1° combinée à la loi de Planck - Einstein entraîne que la fréquence est multipliée par $\cos^2 \theta$ à la sortie du second polariseur. On devrait donc observer un changement de couleur en tournant ce polariseur. Au-delà d'une certaine valeur de θ , la lumière transmise devrait même être invisible. La fréquence ne changeant pas lors de la traversée d'un polariseur, l'hypothèse doit être rejetée.

Selon l'hypothèse 2° il y a une certaine fraction $\cos^2 \theta$ des photons qui sont transmis intégralement. On peut dire ainsi que la probabilité pour qu'un photon soit transmis est $\cos^2 \theta$. Tous les photons sont identiques et pourtant certains sont transmis alors que d'autres sont absorbés. Malgré de nombreuses tentatives personne n'a pu imaginer un mécanisme qui permettrait de prédire avec certitude ce qui arriverait à un photon donné. La théorie quantique ne peut que calculer la probabilité pour qu'un photon soit transmis. Il est évidemment impossible de prédire ce qui arrivera à un photon particulier : c'est la **statistique se rapportant à un grand nombre d'événements qui permet de vérifier la théorie.**

V.2.2 Réflexion partielle de la lumière

Considérons le phénomène familier de la réflexion partielle de la lumière à l'interface entre deux milieux transparents. C'est un phénomène qui est très bien expliqué par la théorie électromagnétique de Maxwell. Dans le cas d'une incidence normale, le

⁴² L'intensité se déduit du module de vecteur de Poynting $(\vec{E} \wedge \vec{B})/\mu_0$ qui correspond à la quantité d'énergie qui traverse pendant une seconde une unité de surface perpendiculaire à la direction de propagation \vec{k} . En moyennant sur une période, cette quantité définit l'intensité du rayonnement.

⁴³ La polarisation peut être obtenue par réflexion sur une surface vitreuse (diélectrique) à l'angle de Brewster : la lumière réfléchie est totalement polarisée rectilignement dans une direction perpendiculaire au plan d'incidence (plan contenant la direction du faisceau incident et la normale à la surface vitreuse). Elle peut être obtenue par réfraction (biréfringence liée à l'anisotropie optique d'un corps) ou au moyen de cristaux optiques uniaxe ou biaxes.

l'expérience montre que 4 % de l'énergie incidente est réfléchié ; il y a donc 96 % de l'énergie qui est transmise dans le second milieu.

Dans l'hypothèse de l'existence des photons et puisque tous les photons sont identiques on peut se demander pourquoi certains sont réfléchis et d'autres sont transmis. On pourrait formuler l'hypothèse que le verre comporte un certain nombre de trous (cylindriques) et que les photons arrivant dans un trou sont transmis alors que ceux qui arrivent entre les trous sont réfléchis. Cette hypothèse est peu crédible car le même phénomène s'observe à la surface de l'eau. Or les molécules sont mobiles dans un liquide. Il n'y a donc aucune raison de supposer qu'il existe des canaux vides qui permettent le passage des photons.

En outre, la quantité d'énergie réfléchié par une couche mince dépend de son épaisseur. Dans le cas d'un verre d'indice de réfraction 1,5 elle peut varier de 0 à 16 %. La quantité réfléchié tend à diminuer avec l'augmentation de l'épaisseur de la lame. Ce fait montre qu'il est impossible d'interpréter la réflexion partielle à partir d'un modèle géométrique simple de la lame mais il montre également l'insuffisance de la notion de probabilité. Si 4% des photons sont réfléchis sur la première face de la lame on ne peut pas expliquer comment l'énergie réfléchié diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la lame.

V.2.3 Nature granulaire de la lumière

On peut montrer expérimentalement la nature granulaire de la lumière en utilisant un éclairage de très faible intensité. Si la théorie de Maxwell était exacte l'énergie reçue varierait de la même façon en tout point de la surface éclairée. L'expérience montre que ce n'est pas ce qui se produit (Figure 2). Au contraire, on voit apparaître des taches localisées produites par les impacts des photons. L'existence de ces derniers n'est plus évidente lorsque l'éclairage est fort : les fluctuations statistiques deviennent relativement moins importantes lorsque le nombre de photons est grand.

L'expérience d'Young réalisée avec une source de très faible intensité permet de mettre en évidence les impacts localisés des photons sur la plaque photographique (figure 3).

Photographie prise avec :

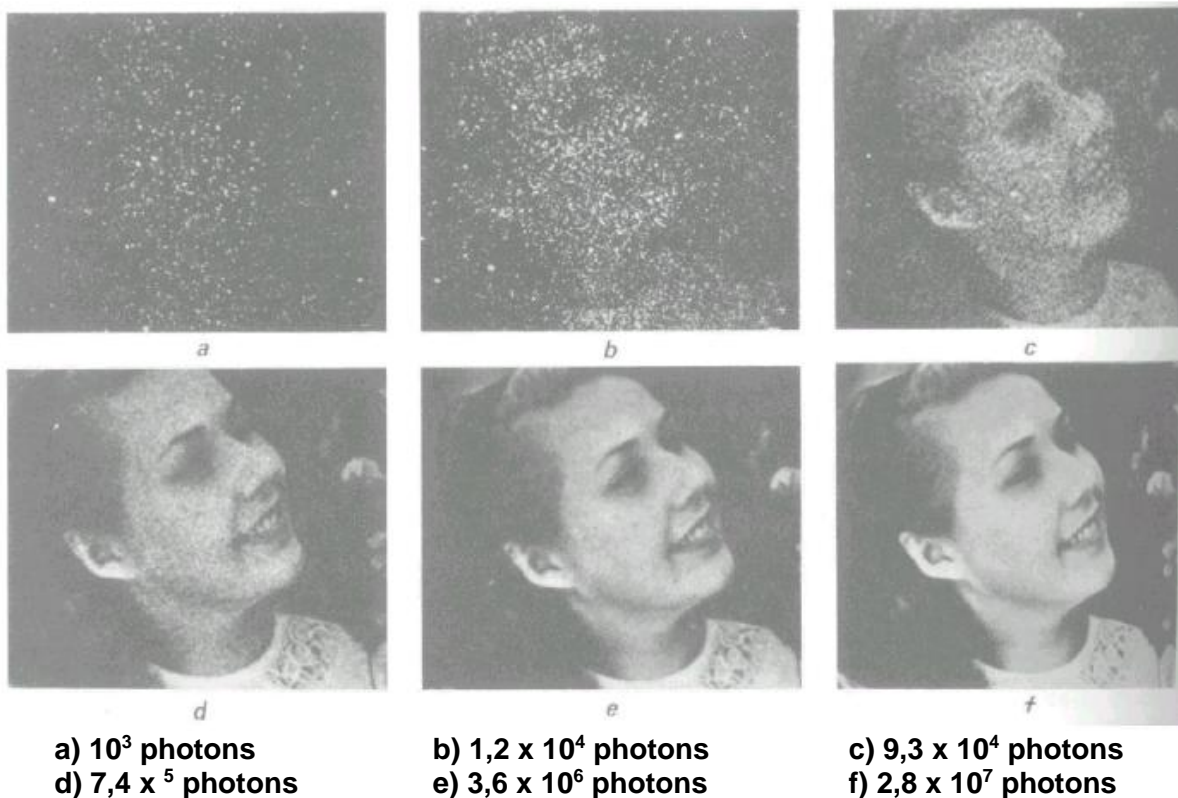
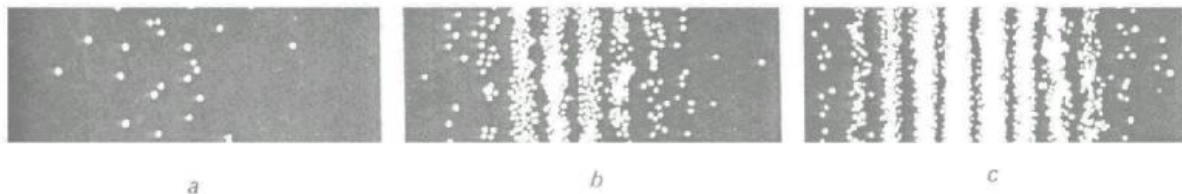


Figure 20 - Photographies



Expérience d'Young avec :

Figure 21 - Franges d'Young

Les franges sombres et les franges brillantes dont l'existence est expliquée par la théorie ondulatoire apparaissent lorsque le nombre de photons est assez grand.

Ici encore la notion de probabilité est insuffisante pour expliquer l'existence de franges sombres. En effet, la probabilité étant un nombre non négatif, on ne peut pas obtenir une probabilité nulle de recevoir un photon à certains endroits lorsque les deux fentes sont ouvertes sans que la probabilité pour que le photon passe par chacune des fentes soit nulle.

V.3 Le comportement quantique

Avant d'introduire le formalisme de la théorie quantique nous allons présenter une expérience de pensée imaginée par R.P. Feynman qui décrit bien les caractéristiques essentielles du comportement quantique. Ce comportement quantique se réfère à l'évolution dans l'espace-temps d'un système physique réalisé au moyen d'une expérience. Une telle expérience sera décrite par l'état initial du système étudié et par ce même état dans un état final.

Considérons le dispositif de Young mais avec une source produisant des corpuscules classiques des balles de fusils (indestructibles) par exemple (**Figure 22**). Un ensemble de détecteurs permet de mesurer le nombre de balles reçues sur l'écran en fonction de la position. Lorsque seul le trou 1 est ouvert cette distribution est donnée par la courbe $N_1(y)$ et lorsque seul le trou 2 est ouvert elle est donnée par $N_2(y)$. Pour la même durée de fonctionnement, lorsque les deux trous sont ouverts on obtient une distribution qui en chaque point est la somme des précédentes :

$$N_{12}(y) = N_1(y) + N_2(y)$$

De plus la détection des balles donne lieu à des impacts bien définis dans l'espace et dans le temps.

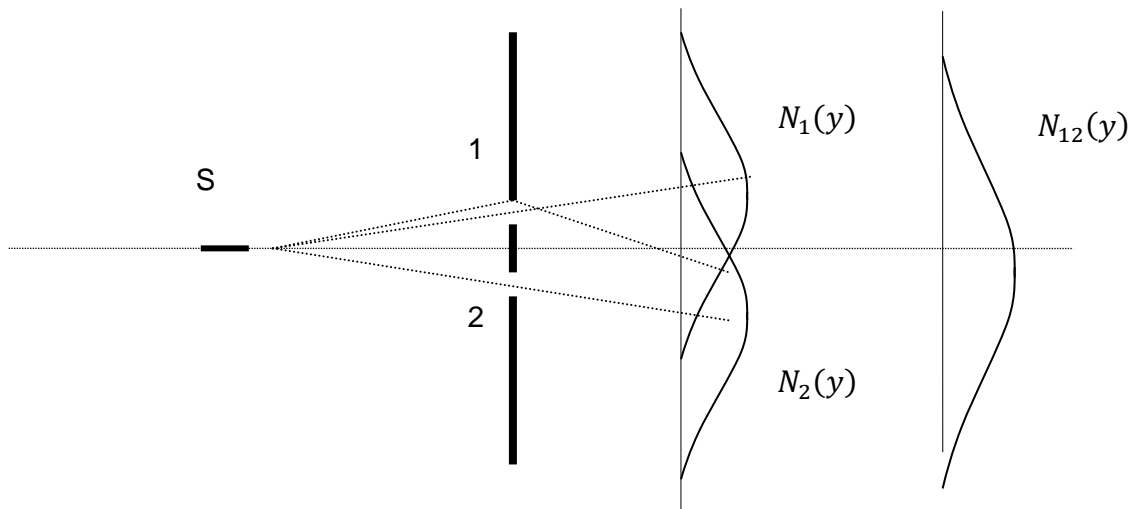


Figure 22 - Dispositif d'Young avec corpuscules matériels

Gardons le même dispositif mais remplaçons la source de particules classiques par une source d'ondes classiques. Lorsque seul le trou 1 est ouvert l'intensité est donnée par $I_1(y)$ et lorsque seul le trou 2 est ouvert, elle est donnée par la courbe $I_2(y)$ (**Figure 23**).

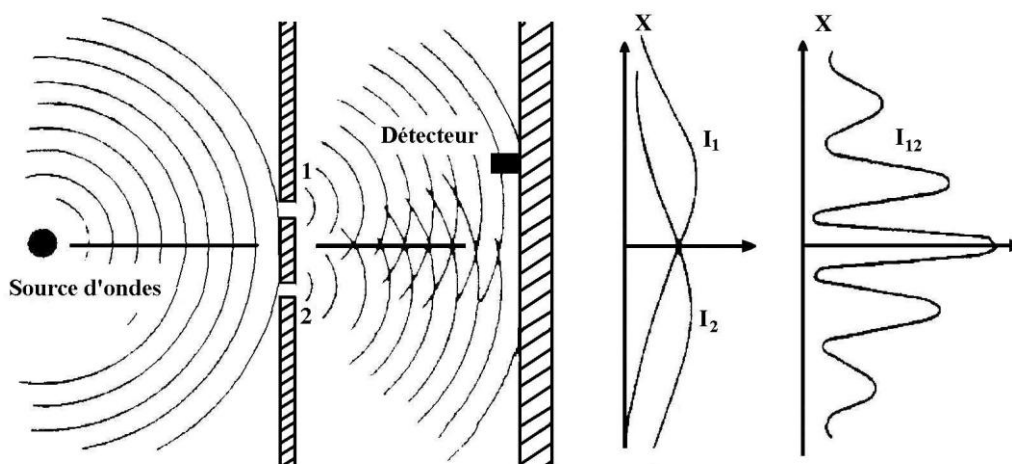


Figure 23 - Ondes classiques

Par contre lorsque les deux trous sont ouverts l'intensité mesurée sur l'écran $I_{12}(y)$ ne ressemble en rien à celle qui est obtenue avec des corpuscules classiques, c'est-à-dire qu'elle est très différente de la somme des intensités mesurées avec un seul trou ouvert :

$$I_{12}(y) \neq I_1(y) + I_2(y)$$

A certains endroits on détecte moins d'énergie avec deux trous ouverts qu'avec un seul trou. L'interférence est alors destructive. La détection de l'énergie se fait de manière continue dans le temps et étalée dans l'espace.

Supposons que la source émette des électrons. Lorsqu'un seul trou est ouvert, on observe une distribution semblable à celle des corpuscules et des ondes classiques. La détection se fait cependant par impacts localisés dans l'espace et dans le temps, ce qui porte à croire que les électrons sont des corpuscules.

Lorsque les deux trous sont ouverts le nombre d'électrons détectés varie très rapidement avec la position manifestant un phénomène d'interférence. En fait la distribution ressemble beaucoup à la fonction $I_{12}(y)$ représentant l'intensité obtenue avec des ondes classiques. Cependant la détection se fait toujours par impacts localisés dans l'espace et dans le temps comme pour des corpuscules.

Les deux aspects, corpusculaire et ondulatoire, se manifestent dans la même expérience. On obtient le même type de résultats avec des photons (**Figure 21**), des neutrons ou même des atomes.

Une conséquence importante de la distribution des électrons observée lorsque les deux trous sont ouverts est qu'il est impossible d'affirmer que chaque électron est passé soit par un trou soit par l'autre. En effet, si c'était le cas on pourrait dire que le nombre d'électrons reçus en chaque point est égal au nombre d'électrons venus par le trou 1 plus le nombre d'électrons venus par le trou 2. Le nombre total d'électrons reçus en tout point lorsque les deux trous sont ouverts ne pourrait jamais être inférieur au nombre reçus au même point lorsqu'un seul trou est ouvert. Il n'y aurait donc pas d'interférence.

On peut essayer de déterminer par quel trou passe chaque électron en les éclairant à l'aide d'une source de lumière (Figure 6).

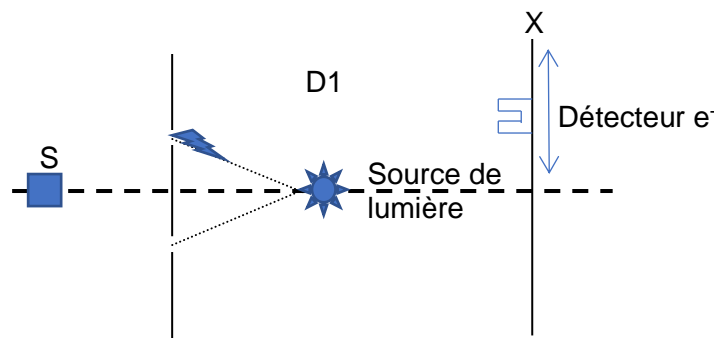


Figure 24 - Eclairage des fentes

L'éclairage des trous permet effectivement de savoir par quelle fente passe chaque électron car la charge électrique diffuse la lumière en émettant un flash de lumière au voisinage d'une fente mais l'interférence disparaît et la distribution devient identique à celle des corpuscules classiques. Les électrons sont manifestement perturbés par la lumière. On peut essayer d'atténuer cette perturbation en diminuant l'intensité de la source de lumière. Dans ce cas elle émet moins de photons et certains électrons ne sont pas vus. Les électrons détectés sans qu'un éclair soit émis possèdent une répartition caractéristique d'un phénomène d'interférence. Par contre, ceux qui ont été vus (éclair émis au voisinage d'un des fentes) ont une répartition semblable à celle des corpuscules classiques.

Une autre façon d'atténuer la perturbation des électrons consiste à diminuer l'énergie et l'impulsion des photons en augmentant la longueur d'onde de la lumière éclairante. Il est possible alors de diminuer suffisamment la perturbation pour que la distribution des électrons détectés manifeste à nouveau un phénomène d'interférence. Cependant, on trouve alors que la longueur d'onde est trop grande pour obtenir un pouvoir séparateur suffisant pour déterminer par quelle fente l'électron est passé.

En résumé, on peut dire que chaque fois qu'une expérience permet de déterminer par quel trou passe chaque électron, leur répartition sur l'écran est semblable à celle des corpuscules classiques. Sinon on observe des interférences.

Remarquons enfin que l'interaction entre quantons ne joue aucun rôle dans ce genre d'expérience. On obtient les mêmes résultats en leur faisant traverser le dispositif un à un.

V.4 Notion d'amplitudes de probabilité pour caractériser l'évolution spatio-temporelle d'un système

La notion de probabilité est insuffisante pour expliquer l'expérience précédente car elle ne permet pas de rendre compte du phénomène d'interférence. En effet étant un nombre positif elle ne peut pas diminuer lors de l'ouverture d'une voie supplémentaire.

Pour résoudre ce problème la théorie quantique fait appel au concept d'**amplitude de probabilité de transition**. Une telle amplitude est **un nombre complexe dont le carré du module représente la probabilité de cette transition**. En présence de deux ou plusieurs voies ou alternatives possibles pour une transition donnée, il faut une règle permettant de calculer les amplitudes et les probabilités. La **superposition des amplitudes** (PSAP) joue un rôle capital en théorie quantique :

Il stipule que lorsqu'une transition peut se faire par deux ou plusieurs alternatives en principe indiscernables, l'amplitude totale est la somme des amplitudes associées à chaque voie.

La probabilité est donc le carré du module de la somme des amplitudes.

Dans le cas où une source émettrait des électrons comme dans l'expérience précédente on note A_1 ou A_2 l'amplitude de probabilité pour que l'électron aille de la source à un point de l'écran lorsque la seule fente 1 ou 2 est ouverte respectivement. La probabilité de transition est donnée par :

$$P_1 = A_1 A_1^* = |A_1|^2$$

ou

$$P_2 = A_2 A_2^* = |A_2|^2$$

selon que c'est la fente 1 ou la fente 2 qui est ouvert à l'exclusion de l'autre.

Lorsque les deux fentes sont ouvertes et aucune expérience n'est faite pour déterminer par quel trou passent les électrons, les deux voies sont indiscernables et d'après le PSAP il faut additionner les amplitudes :

$$P_{12} = (A_1 + A_2)(A_1^* + A_2^*)$$

soit :

$$P_{12} = A_1 A_1^* + A_2 A_2^* + A_1^* A_2 + A_1 A_2^*$$

ou bien :

$$P_{12} = A_1 A_1^* + A_2 A_2^* + 2\text{Re}\{A_1^* A_2\}$$

Les deux premiers termes sont positifs mais le dernier peut être positif ou négatif. Il représente l'interférence.

Lorsque les deux voies sont en principe discernables le PSAP ne s'applique pas. Il **faut additionner les probabilités associées à chaque voie**. On a alors :

$$P_{12} = A_1 A_1^* + A_2 A_2^*$$

c'est-à-dire :

$$P_{12} = P_1 + P_2$$

Dans ce cas l'interférence disparaît.

Seule **la probabilité est mesurable par l'expérience**. La phase de l'amplitude totale est sans importance car seul le carré de son module est accessible à la mesure. Les probabilités sont inchangées si toutes les amplitudes sont multipliées par un facteur $e^{i\alpha}$. Un tel facteur est appelé **facteur de phase**.

La phase relative des amplitudes (déphasage) est cependant très importante car c'est elle qui détermine si l'interférence est constructive ou destructive. La somme de deux amplitudes est maximale (en module) lorsqu'elles sont en phase c'est-à-dire lorsque les vecteurs du plan complexe qui les représentent ont la même orientation. De même le module de l'amplitude résultante est minimal si leur déphasage est π ; elles sont alors représentées par des vecteurs opposés dans le plan complexe. Dans le premier cas l'interférence est constructive. Toutes les situations intermédiaires sont évidemment possibles (Figure 25).

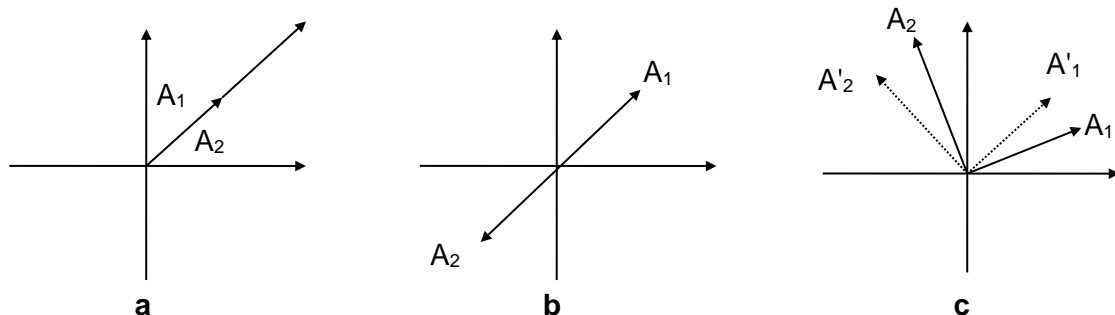


Figure 25 - - Représentation des amplitudes dans le plan complexe

V.5 Calcul des amplitudes et des probabilités

Pour calculer les amplitudes et les probabilités dans des situations assez réalistes il faut définir des règles précises qui peuvent être considérées comme les postulats de la théorie quantique.

Avant de les énoncer nous introduirons la notation de Dirac couramment utilisée pour désigner une amplitude de probabilité.

L'amplitude de probabilité de transition entre deux états s'écrit sous la forme :

$$\langle \text{état final} | \text{état initial} \rangle$$

Ainsi l'amplitude de probabilité pour qu'un électron aille de la source au détecteur lorsque la seule fente est ouverte 1 peut s'écrire :

$$A_1 = \langle D | S \rangle_1$$

Pour la seule fente 2 ouverte :

$$A_2 = \langle D | S \rangle_2$$

En plus du PSAP deux autres principes sont nécessaires pour permettre de calculer les amplitudes et les probabilités.

V.5.1 Principe d'addition des probabilités

Lorsqu'il existe plusieurs états finaux disjoints ou distincts la probabilité de transition vers l'ensemble de ces états est la somme des probabilités de transition vers chacun de ces états.

Lorsqu'une transition peut se faire par des voies intermédiaires en principe discernables, chacun de ses états peut être considéré comme final pour une partie de la transition. La règle d'addition des probabilités que nous avons déjà énoncée peut être considérée comme un cas particulier du principe d'addition des probabilités de transition vers des états finaux distincts.

V.5.2 Principe de factorisation séquentielle.

Lorsqu'une transition s'effectue en passant par un état intermédiaire bien défini(s) l'amplitude de probabilité de transition est le produit des amplitudes associées à chaque étape de la transition :

$$\langle v|u \rangle_s = \langle v|s \rangle \langle s|u \rangle$$

Dans le cas particulier de l'expérience réalisée avec le dispositif d'Young la transition de la source au détecteur peut se faire par l'intermédiaire de l'un ou l'autre trou. Le principe de factorisation séquentielle permet d'écrire :

$$A_1 = \langle D|S \rangle_1 = \langle D|1 \rangle \langle 1|S \rangle$$

$$A_2 = \langle D|S \rangle_2 = \langle D|2 \rangle \langle 2|S \rangle$$

L'expression $\langle i|S \rangle$ représente l'amplitude de probabilité pour que le quanton quitte la source S pour arriver à la fente i et $\langle D|i \rangle$ représente l'amplitude de probabilité pour qu'il aille de la fente i au détecteur.

Le type de transition intervenant dans les expériences étudiées ici est en fait une propagation dans l'espace-temps. Dans le cas des photons nous pourrions donner une expression très simple. Elle expliquera ainsi tous les phénomènes déjà expliqués par l'optique ondulatoire et par l'optique géométrique.

V.6 Propagation rectiligne de la lumière

Les photons se déplacent-ils en ligne droite dans le vide ? A première vue la réponse semblait être positive car l'expérience quotidienne nous permet d'observer facilement le phénomène de propagation rectiligne de la lumière (visible). C'est d'ailleurs cette observation qui a conduit au développement du modèle géométrique. En revanche l'existence d'une trajectoire bien définie pour le photon est incompatible avec l'inégalité d'Heisenberg. Comment concilier ces propriétés qui semblent être en contradiction ?

On peut essayer de résoudre ce dilemme en faisant une expérience appropriée :

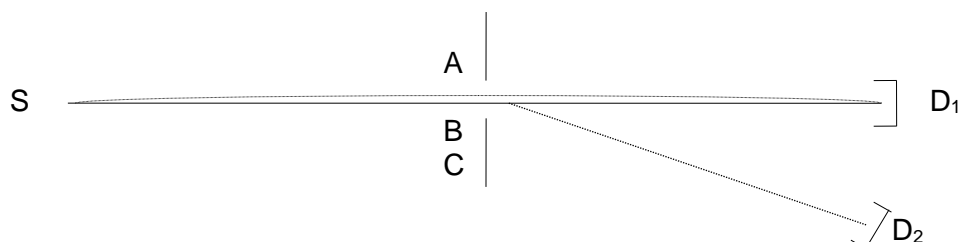


Figure 26 - Trajet rectiligne de la lumière

Une source de lumière S émet des photons dont certains passent à travers une fente AB percée dans un écran opaque. Un détecteur D_1 est placé de telle sorte qu'il existe des trajets rectilignes allant de la source à ce détecteur. Un autre détecteur D_2 est placé de telle sorte qu'il n'existe aucun trajet rectiligne le reliant à la source et passant par la fente. Si le détecteur D_1 reçoit des photons alors que le détecteur D_2 n'en reçoit aucun on dira que les photons se propagent en ligne droite.

Supposons qu'une expérience conduise effectivement au résultat suivant : D_1 reçoit des photons et D_2 n'en reçoit pas. C'est précisément le critère choisi pour affirmer que les photons ont des trajectoires rectilignes. Il faut cependant remarquer que la précision de la trajectoire est limitée par la largeur de la fente. On ne peut pas exclure a priori la trajectoire pointillée allant de S à D_1 . Pour le faire, et du même coup améliorer la précision, il faut rétrécir la fente. L'expérience montre qu'alors le détecteur D_2 commence à recevoir des photons.

Analysons cette expérience à l'aide du PSAP. Il y a un grand nombre de chemins allant de la source au détecteur D_2 et passant par la fente (mathématiquement il y en a une infinité).

A chacun de ces chemins, on associe une amplitude de probabilité dont la phase est déterminée par le temps de parcours. selon :

$$A = \rho e^{\theta}$$

où ρ est caractéristique du trajet optique et θ est lié au temps de parcours du trajet selon :

$$\theta = \omega t$$

où ω est la pulsation du photon.

Puisque le module de l'amplitude ne dépend que de la longueur du trajet on peut le considérer comme constant car les trajets considérés sont très proches. Les différents chemins étant indiscernables, il faut additionner les différentes amplitudes associées à chaque trajet pour obtenir l'amplitude résultante dont le carré du module est proportionnel à la probabilité de recevoir un photon. Si la somme des amplitudes est nulle dans une direction donnée (θ) de D_2 , il est clair que D_2 ne reçoit aucun photon. **Nous allons essayer d'estimer la plus petite valeur de θ compatible avec cette condition.**

Remarquons d'abord que si la différence de phase entre les amplitudes associées aux chemins extrêmes ne dépasse pas π , la somme des amplitudes ne peut pas être nulle (**Figure 27**). Si d est la largeur de la fente, la différence de marche entre le chemin le plus court de temps de parcours t ($e^{i\omega t}$) et le chemin le plus long de temps de parcours $t + \Delta t$ $e^{i\omega(t+\Delta t)}$ passant par la fente est $d \sin \theta$. La différence de temps de parcours est donc $\Delta t = \frac{d \sin \theta}{c}$ soit une différence de phase :

$$\Delta\phi = \frac{\omega}{c} d \sin \theta$$

ou

$$\Delta\phi = kd \sin \theta$$

La condition nécessaire pour que D_2 ne reçoive pas de photons est donc que $\Delta\phi$ dépasse π :

$$kd \sin \theta > \pi$$

soit :

$$(36) \quad d \sin \theta_{min} = \frac{\lambda}{2}$$

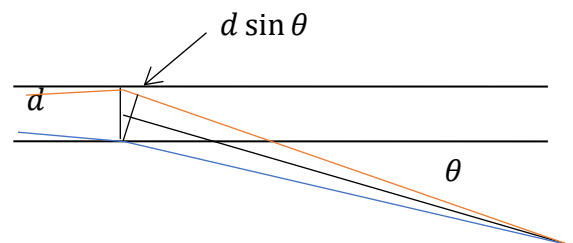


Figure 27 - PSAP

L'angle θ_{min} le plus petit au-delà duquel que D_2 ne reçoit aucun photon est donc :

$$\sin \theta_{min} = \frac{\lambda}{2d}$$

Des photons arrivent donc dans toutes les directions comprises entre $+\theta_{min}$ et $-\theta_{min}$. Si on diminue la largeur de la fente pour améliorer la précision sur la trajectoire la dispersion angulaire augmente. Ce phénomène est connu en optique sous le nom de diffraction de la lumière. Cette expérience nous montre que la trajectoire des photons n'est pas bien définie car le fait de bien préciser leur position rend leur impulsion indéterminée.

En multipliant par la constante de Planck chaque côté de l'égalité précédente (1) on a :

$$d \frac{h}{\lambda} \sin \theta_{min} = \frac{h}{2}$$

soit :

$$(37) \quad dp \sin \theta_{min} = \frac{h}{2}$$

L'extension en impulsion est donnée par :

$$\Delta p_y = p \sin \theta_{min}$$

et l'extension spatiale par :

$$\Delta y = d$$

On retrouve donc la valeur inférieure de l'inégalité d'Heisenberg :

$$\Delta y \Delta p_y = \frac{h}{2}$$

Cette inégalité découle du PSAP.

Ainsi, si on cherche à déterminer la position du photon avec une grande précision pour montrer que sa trajectoire est rectiligne on trouve qu'il a une probabilité non nulle d'arriver dans le détecteur D_2 , ce qui montre bien que sa trajectoire n'est pas rectiligne et donc que des trajets non rectilignes sont des alternatives dont il faut considérer l'AP.

On peut également interpréter ce résultat à l'aide du PSAP. La différence de marche entre les chemins extrêmes devient plus grande lorsque la fente est élargie. La différence de phase des amplitudes associées devient assez grande pour que l'amplitude résultante s'annule. Il est clair que c'est l'interférence entre les amplitudes de probabilité qui annule la probabilité pour qu'un photon arrive sur D_2 .

VI ETATS QUANTIQUES

VI.1 Notion d'états quantiques

Jusqu'à présent les lois de la physique quantique ont été formulées à l'aide du concept d'amplitude de probabilité de transition. Une transition implique toujours une paire d'états. Nous allons voir qu'il est possible de donner une signification physique à chaque état. Il en résultera une grande simplification formelle.

Nous pouvons faire l'analogie avec l'espace ordinaire R^3 . La position d'un point dans l'espace peut être donnée par un ensemble de 3 nombres qui sont les coordonnées par rapport à un système d'axes défini au préalable. **Le changement de repère associera au point un ensemble de nouvelles coordonnées.** Cependant l'utilisation de la notion de vecteur géométrique et les règles de calcul vectoriel permettent de s'affranchir de la référence à un système d'axe ce qui simplifie considérablement les formulations et les raisonnements.

Nous présentons une démarche de ce type dans ce chapitre.

Nous postulons donc que l'**état quantique** d'un système physique quelconque est caractérisé par un vecteur d'état appartenant à un espace vectoriel linéaire complexe appelé **espace des états du système**.

Cet espace est un sous-espace d'un espace de Hilbert⁴⁴. Cet état est défini indépendamment de grandeurs physiques observables comme pourraient l'être les positions et les impulsions mécaniques décrivant l'état d'un système décrit selon la mécanique classique. Ceci étant l'état quantique d'un système à instant donné décrit les mesures antérieures que l'on a opérées sur le système et les résultats obtenus lors des mesures car la mesure d'un système perturbe le système et donc modifie son état, l'état étant directement relié aux résultats obtenus lors de la mesure.

La notion d'état d'un système ne peut être disjointe de la façon de le produire ou le préparer. Par exemple, un photon sera dit dans un état de polarisation circulaire gauche s'il vient de traverser un polariseur circulaire gauche.

VI.2 Espace des états

VI.2.1 Notation

Nous avons utilisé une notation selon laquelle l'amplitude de probabilité de transition d'un état Ψ à un état Φ est notée $\langle \Phi | \Psi \rangle$. Nous montrons que chaque partie de cette formulation possède une signification.

Un vecteur quelconque de l'espace des états noté ε est appelé **vecteur ket** ou ket. On le note $|\rangle$ en faisant figurer à l'intérieur un caractère distinctif permettant de différencier cet état des autres :

$$|\Psi\rangle \text{ ket de l'espace des états } \varepsilon$$

Remarque

Insistons sur le fait qu'il n'existe dans $|\Psi\rangle$ aucune dépendance à une grandeur telle que \vec{r} ou \vec{p} (ou leurs composantes) caractéristiques du système physique dont l'état quantique est représenté par $|\Psi\rangle$.

⁴⁴ Un espace de Hilbert est un espace préhilbertien séparé et complet. Un espace préhilbertien est un espace vectoriel sur \mathbf{C} (ou \mathbf{R}) muni d'une forme sesquilinéaire (anti-linéaire par rapport au premier vecteur et linéaire par rapport au second) auto-adjointe. Lorsque cette forme est définie positive, il s'agit d'un produit scalaire hermitien et cet espace devient un espace préhilbertien séparé.

VI.2.2 Produit scalaire hermitien

A tout couple de kets $|\Phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$ de ε pris dans cet ordre, on associe un nombre complexe qui est leur produit scalaire $(|\Phi\rangle, |\Psi\rangle)$.

Les propriétés de ce produit scalaire sont :

- ❖ linéarité par rapport au second ket :

$$(|\Phi\rangle, \lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1(|\Phi\rangle, |\Psi_1\rangle) + \lambda_2(|\Phi\rangle, |\Psi_2\rangle)$$

- ❖ antilinéarité par rapport au premier ket :

$$(\lambda_1|\Phi_1\rangle + \lambda_2|\Phi_2\rangle, |\Psi\rangle) = \lambda_1^*(|\Phi_1\rangle, |\Psi\rangle) + \lambda_2^*(|\Phi_2\rangle, |\Psi\rangle)$$

- ❖ $\forall |\Psi\rangle \in \varepsilon, (|\Psi\rangle, |\Psi\rangle)$ est réel et positif. En outre $(|\Psi\rangle, |\Psi\rangle) = 0$ si et seulement si $|\Psi\rangle = 0$ (cas non physique)

- ❖ symétrie hermitienne

$$(|\Phi\rangle, |\Psi\rangle) = (|\Psi\rangle, |\Phi\rangle)^*$$

La norme d'un vecteur $|\Psi\rangle$ de ε est définie :

$$\| |\Psi\rangle \|^2 = (|\Psi\rangle, |\Psi\rangle)$$

VI.3 Espace dual

VI.3.1 Définition

Une fonctionnelle linéaire χ est opération linéaire qui à tout ket $|\Psi\rangle$ associe un nombre complexe :

$$|\Psi\rangle \in \varepsilon \xrightarrow{\chi} \text{nombre noté : } \chi|\Psi\rangle$$

La linéarité est définie par :

$$\chi(\lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1\chi(|\Psi_1\rangle) + \lambda_2\chi(|\Psi_2\rangle)$$

L'ensemble des fonctionnelles linéaires définies sur $|\Psi\rangle \in \varepsilon$ constitue un espace vectoriel que l'on appelle **espace dual** de ε noté ε^* .

VI.3.2 Notation bra

Un élément quelconque de ε^* est appelé **vecteur bra** ou bra. On le note $\langle \quad |$ muni d'un signe distinctif permettant de distinguer une fonctionnelle d'une autre. Par exemple $\langle \chi |$ désigne la fonctionnelle linéaire χ et on utilisera la notation $\langle \chi | \Psi \rangle$ pour désigner le nombre obtenu en faisant agir $\langle \chi |$ de ε^* sur $|\Psi\rangle \in \varepsilon$:

$$\langle \chi | \Psi \rangle = \chi|\Psi\rangle$$

Remarque

En anglais le terme $\langle \quad |$ s'appelle bracket (crochet) d'où l'origine de l'appellation bra pour la partie gauche $\langle \quad |$ et ket pour la partie droite $|\quad\rangle$.

VI.3.3 Correspondance entre kets et bras

L'existence d'un produit scalaire dans ε nous permet de montrer qu'à tout ket $|\Phi\rangle \in \varepsilon$, on peut associer un élément de ε^* c'est-à-dire un bra noté $\langle \Phi |$.

En effet le ket $|\Phi\rangle$ nous permet de définir une fonctionnelle linéaire :

Celle qui à tout ket $|\Psi\rangle \in \varepsilon$ fait correspondre le nombre complexe égal au produit scalaire $(|\Phi\rangle, |\Psi\rangle)$ de $|\Psi\rangle$ par $|\Phi\rangle$. Soit $\langle \Phi |$ cette fonctionnelle linéaire.

On a donc :

$$(|\Phi\rangle, |\Psi\rangle) = \langle\Phi|\Psi\rangle$$

Ainsi les propriétés du produit scalaire énoncées précédemment sont re écrites :

❖ linéarité par rapport au second ket :

$$(|\Phi\rangle, \lambda_1|\Psi_1\rangle + \lambda_2|\Psi_2\rangle) = \lambda_1(|\Phi\rangle, |\Psi_1\rangle) + \lambda_2(|\Phi\rangle, |\Psi_2\rangle) = \lambda_1\langle\Phi|\Psi_1\rangle + \lambda_2\langle\Phi|\Psi_2\rangle$$

❖ anti-linéarité par rapport au premier ket :

$$(\lambda_1|\Phi_1\rangle + \lambda_2|\Phi_2\rangle, |\Psi\rangle) = \lambda_1^*(|\Phi_1\rangle, |\Psi\rangle) + \lambda_2^*(|\Phi_2\rangle, |\Psi\rangle) = \lambda_1^*\langle\Phi_1|\Psi\rangle + \lambda_2^*\langle\Phi_2|\Psi\rangle$$

$$= (\lambda_1^*\langle\Phi_1| + \lambda_2^*\langle\Phi_2|)|\Psi\rangle$$

❖ *symétrie hermitienne :*

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^*$$

❖ *$\langle\Psi|\Psi\rangle$ réel positif.*

L'anti-linéarité du produit scalaire entraîne que le bra associé au ket $\lambda_1|\Phi_1\rangle + \lambda_2|\Phi_2\rangle$ est $\lambda_1^*\langle\Phi_1| + \lambda_2^*\langle\Phi_2|$ puisque la relation donnée ci-dessus est vérifiée pour tout ket $|\Psi\rangle \in \varepsilon$. La correspondance ket \rightarrow bra appelée **conjugaison hermitique** est anti-linéaire.

VI.4 Opérateurs linéaires

Un opérateur est un objet mathématique qui à tout vecteur d'un espace vectoriel ε fait correspondre un autre vecteur de cet espace. C'est donc une application de ε sur ε . Par définition, à tout ket un opérateur fait correspondre un autre ket et à tout bra il fait correspondre un autre bra :

$$\hat{A}|v\rangle = |w\rangle \text{ où } |v\rangle \text{ et } |w\rangle \in \varepsilon$$

Remarque

La notation $|\hat{A}v\rangle$ (bien que peu usitée) existe provenant de la notation mathématique du produit scalaire de deux vecteurs v et $w \in \varepsilon$ espace vectoriel complexe : $(w|\hat{A}(v))$. Elle est liée à la notation habituelle : $|\hat{A}v\rangle = \hat{A}|v\rangle$

VI.4.1 Linéarité

Soit \hat{A} un opérateur tel que :

$$\hat{A}|u_1\rangle = |v_1\rangle \text{ et } \hat{A}|u_2\rangle = |v_2\rangle.$$

On dit que \hat{A} est linéaire si :

$$\hat{A}(\lambda_1|u_1\rangle + \lambda_2|u_2\rangle) = \lambda_1\hat{A}|u_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|u_2\rangle = \lambda_1|v_1\rangle + \lambda_2|v_2\rangle$$

Le produit de deux opérateurs est l'opérateur unique qui les remplace.

Ainsi \hat{C} est le produit des opérateurs \hat{A} et \hat{B} pris dans cet ordre si pour tout $|\varphi\rangle \in \varepsilon$:

$$\hat{A}\hat{B}|\varphi\rangle = \hat{C}|\varphi\rangle$$

VI.4.2 Adjoint d'un opérateur

L'adjoint d'un opérateur \hat{A} est l'opérateur noté \hat{A}^\dagger qui, dans l'espace dual, établit les mêmes correspondances que \hat{A} dans l'espace des états.

Ainsi l'expression $\hat{A}|u_1\rangle = |v_1\rangle$ implique $\langle u_1|\hat{A}^\dagger = \langle v_1|$.

L'opérateur se place à gauche du ket ou à droite du bra.

Remarque

La notation $\langle \hat{A}w |$ (bien que peu usitée) existe également. Mais on sort l'opérateur du bra à droite en considérant l'adjoint de l'opérateur : $\langle \hat{A}w | = \langle w | \hat{A}^\dagger$

Recherchons qu'elle est l'adjoint d'un produit d'opérateurs.

Posons :

$$\hat{B}\hat{A}|u\rangle = \hat{B}|v\rangle = |w\rangle$$

soit :

$$(38) \quad |v\rangle = \hat{A}|u\rangle \text{ et } |w\rangle = \hat{B}|v\rangle$$

On dira que $\hat{C} = \hat{B}\hat{A}$ si pour tout ket de ε :

$$\hat{C}|u\rangle = |w\rangle.$$

L'adjoint de \hat{C} est tel que :

$$\langle w| = \langle u|\hat{C}^\dagger$$

Or on a d'après (38) :

$$\langle w| = \langle v|\hat{B}^\dagger$$

ou encore :

$$\langle w| = \langle u|\hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger$$

soit :

$$\hat{C}^\dagger = (\hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{A}^\dagger\hat{B}^\dagger$$

L'adjoint d'un produit d'opérateurs est le produit des adjoints pris dans l'ordre inverse.

VI.4.3 Opérateur hermitique

Par définition un opérateur est dit hermitique (ou hermitien ou encore auto-adjoint) s'il est égal à son adjoint : $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

VI.4.4 Opérateur unitaire

Un opérateur est dit unitaire si : $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$

Dit autrement puisque l'inverse \hat{A}^{-1} d'un opérateur \hat{A} est tel que :

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1}$$

Un opérateur est dit unitaire si son inverse est égal à son adjoint :

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

Une transformation réalisée à l'aide d'un tel opérateur est dite unitaire. Elle possède la propriété remarquable de laisser invariant le produit scalaire. En effet, si on a :

$$|X'\rangle = \hat{U}|X\rangle \text{ et } |Y'\rangle = \hat{U}|Y\rangle$$

alors :

$$\langle Y'|X'\rangle = \langle Y|\hat{U}\hat{U}^\dagger|X\rangle = \langle Y|X\rangle$$

En particulier, la norme d'un vecteur ket (racine carrée du produit scalaire du vecteur avec lui-même) est invariante lors d'une transformation unitaire.

VI.4.5 Transformation d'un opérateur

Soit :

$$(39) \quad |Y\rangle = \hat{A}|X\rangle$$

Cherchons \hat{A}' tel que :

$$|Y'\rangle = \hat{A}'|X'\rangle$$

D'après l'égalité (39) on a :

$$\hat{U}|Y\rangle = \hat{U}\hat{A}|X\rangle = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger\hat{U}|X\rangle$$

soit :

$$\begin{aligned} |Y'\rangle &= \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger|X'\rangle \\ \Rightarrow \hat{A}' &= \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger \end{aligned}$$

VI.4.6 Élément de matrice d'un opérateur

$\langle Y|\hat{A}|X\rangle$ est un nombre appelé élément de matrice de l'opérateur \hat{A} .

Dans le cas général on a :

$$\langle Y|\hat{A}|X\rangle = \langle Y|X'\rangle = \langle X'|Y\rangle^*$$

soit :

$$\langle Y|\hat{A}|X\rangle = (\langle X|\hat{A}^\dagger|Y\rangle)^*$$

Si \hat{A} est hermitique on a :

$$\langle Y|\hat{A}|X\rangle = (\langle X|\hat{A}|Y\rangle)^*$$

Tout élément de matrice d'un opérateur hermitique est le conjugué complexe de son transposé. En particulier le nombre $\langle X|\hat{A}|X\rangle$ est réel si \hat{A} est hermitique.

Nous verrons plus loin l'importance des opérateurs hermitiques en physique quantique.

VI.5 Vecteurs propres et valeurs propres

Soit \hat{A} un opérateur linéaire. Le ket $|x\rangle$ est ket propre de \hat{A} si le vecteur $\hat{A}|x\rangle$ est proportionnel à $|x\rangle$ c'est-à-dire si :

$$(40) \quad \hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$$

λ est la valeur propre de \hat{A} associée au vecteur propre $|x\rangle$. Si à une valeur propre correspond deux ou plusieurs vecteurs propres, on dit qu'elle est dégénérée. Ces vecteurs engendrent un sous-espace associé à la valeur propre.

Dans la suite, par soucis de simplification, nous supposons que les valeurs propres sont non dégénérées.

Ecrivons la relation (40) dans l'espace dual :

$$(41) \quad \langle x|\hat{A}^\dagger = \lambda^*\langle x|$$

Les relations (40) et (41) donnent :

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{A}|x\rangle &= \lambda\langle x|x\rangle \\ \langle x|\hat{A}^\dagger|x\rangle &= \lambda^*\langle x|x\rangle \end{aligned}$$

Si \hat{A} est un opérateur hermitique ($\hat{A} = \hat{A}^\dagger$), on a $\lambda = \lambda^*$. Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont donc réelles.

Considérons deux kets propres $|x_1\rangle$ et $|x_2\rangle$ du même opérateur hermitique :

$$(42) \quad \hat{A}|x_1\rangle = \lambda_1|x_1\rangle$$

$$(43) \quad \hat{A}|x_2\rangle = \lambda_2|x_2\rangle$$

Dans l'espace dual :

\hat{A} étant un opérateur hermitique ($\hat{A} = \hat{A}^+$), sa valeur propre est réelle, on peut donc écrire :

$$(44) \quad \langle x_2|\hat{A} = \lambda_2\langle x_2|$$

Des relations (42) et (44), on tire :

$$\begin{aligned}\langle x_2|\hat{A}|x_1\rangle &= \lambda_1\langle x_2|x_1\rangle \\ \langle x_2|\hat{A}|x_1\rangle &= \lambda_2\langle x_2|x_1\rangle\end{aligned}$$

En soustrayant ces deux équations, on obtient :

$$0 = (\lambda_1 - \lambda_2)\langle x_2|x_1\rangle$$

Si $\lambda_1 \neq \lambda_2$ cela implique $\langle x_2|x_1\rangle = 0$. Ainsi les vecteurs propres d'un opérateur hermitique associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.

Lors d'un changement de base réalisé au moyen d'une transformation unitaire, l'équation (40) devient :

$$\hat{U}\hat{A}|x\rangle = \lambda\hat{U}|x\rangle$$

soit :

$$\hat{U}\hat{A}\hat{U}^+\hat{U}|x\rangle = \lambda\hat{U}|x\rangle$$

Or :

$$|x'\rangle = \hat{U}|x\rangle \text{ et } \hat{A}' = \hat{U}\hat{A}\hat{U}^+$$

Ainsi, l'équation aux valeurs propres prend la forme :

$$\hat{A}'|x'\rangle = \lambda|x'\rangle$$

En conséquence, lors d'une transformation unitaire, les opérateurs et les vecteurs propres sont modifiés mais leurs valeurs propres sont inchangées.

Un changement de base en physique quantique est analogue à un changement de repère en physique classique. Il est évident que toute grandeur physique mesurable doit rester invariante lors d'un changement de base. Les produits scalaires (ou amplitude de probabilité de transition) et les valeurs propres des opérateurs possèdent cette propriété d'invariance. Nous avons vu que les probabilités de transition sont des carrés de modules des produits scalaires. Les valeurs propres représentent les résultats possibles que l'on peut obtenir lors de la mesure d'une grandeur physique.

VI.6 Bases de l'espace des états

Supposons que l'ensemble $\{|u_k\rangle\}$ forme une base de l'espace des états d'un système. Tout état $|\Psi\rangle$ de ce système peut donc être développé sur cette base, c'est-à-dire qu'on peut l'écrire sous la forme :

$$(45) \quad |\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N C_k |u_k\rangle$$

La donnée des coefficients du développement c_k définit complètement l'état du système. La dimension de l'espace N est le nombre maximum de vecteurs linéairement indépendants qu'il peut contenir. La dimension de l'espace des états dépend du système étudié et elle peut aller de deux à l'infini. Le développement (45) est une superposition linéaire d'états.

Supposons que les produits scalaires des vecteurs de base vérifient la condition.

$$\langle u_k | u_l \rangle = \delta_{k,l}$$

où $\delta_{k,l}$ est le delta de Kronecker (sa valeur est 1 si les indices sont égaux et 0 s'ils sont différents).

La norme de chaque vecteur de base est donc 1 et ils sont tous orthogonaux entre eux. On dit alors que la base est orthonormée. Dans la suite nous supposons toujours que la base utilisée est orthonormée.

On peut trouver les coefficients du développement en projetant l'équation (45) sur un état de base particulier.

$$\langle u_l | \Psi \rangle = \sum_{k=1}^N C_k \langle u_l | u_k \rangle$$

soit :

$$\langle u_l | \Psi \rangle = \sum_{k=1}^N C_k \delta_{k,l}$$

soit :

$$\langle u_l | \Psi \rangle = C_l$$

Chaque coefficient du développement est donc **une amplitude de probabilité de transition de l'état initial à l'un des états de la base**. C'est pourquoi ces coefficients sont appelés amplitudes d'états. La probabilité pour trouver le système dans l'état $|u_l\rangle$ est donc :

$$C_l^* C_l = \langle \Psi | u_l \rangle \langle u_l | \Psi \rangle$$

Un projecteur \hat{P} est un opérateur hermitique vérifiant la condition :

$$\hat{P}\hat{P} = \hat{P}^2 = \hat{P}$$

Pour illustrer ce type d'opérateur considérons le cas d'un vecteur \vec{A} de l'espace ordinaire (\mathbb{R}^3). Si \hat{P}_x , \hat{P}_y et \hat{P}_{xy} sont respectivement les projecteurs sur l'axe des x, sur l'axe des y et dans le plan x y, on doit avoir :

$$\begin{aligned}\hat{P}_x \vec{A} &= A_x \vec{i} \\ \hat{P}_y \vec{A} &= A_y \vec{j} \\ \hat{P}_{xy} \vec{A} &= A_x \vec{i} + A_y \vec{j}\end{aligned}$$

Le simple produit scalaire par un vecteur de base ne peut pas représenter un opérateur car à partir d'un vecteur il donne un scalaire. Il faut donc une paire de vecteurs pour représenter un opérateur ($\hat{P}_x = \vec{i}\vec{i}$, $\hat{P}_y = \vec{j}\vec{j}$). Le second disparaît dans le produit scalaire et le premier permet de donner un caractère vectoriel au résultat. Par exemple on a :

$$\vec{i} \cdot \vec{A} = \vec{i} A_x = A_x \vec{i}$$

On vérifie facilement que chacun des opérateurs de projection satisfait à la condition :

$$\hat{P}\hat{P} = \hat{P}^2 = \hat{P}$$

L'opérateur $\vec{i}\vec{i} + \vec{j}\vec{j} + \vec{k}\vec{k}$ appliqué à tout vecteur \vec{A} donne le même vecteur comme résultat. Il est donc équivalent à l'opérateur identité :

$$\vec{i}\vec{i} + \vec{j}\vec{j} + \vec{k}\vec{k} = \hat{1}$$

On dit alors que les vecteurs \vec{i} , \vec{j} et \vec{k} vérifient la relation de fermeture. De manière générale, chaque fois que des vecteurs forment une base orthonormée ils vérifient la relation de fermeture et réciproquement.

Dans le cas de l'espace des états d'un système physique la projection du vecteur d'état $|\Psi\rangle$ sur un vecteur de base $|u_j\rangle$ est :

$$\hat{P}_j|\Psi\rangle = c_j|u_j\rangle$$

avec $c_j = \langle u_j|\Psi\rangle$.

On a donc :

$$\hat{P}_j|\Psi\rangle = |u_j\rangle\langle u_j|\Psi\rangle \quad \forall |\Psi\rangle$$

soit :

$$\hat{P}_j = |u_j\rangle\langle u_j|$$

Une somme de tels projecteurs peut être considérée comme un projecteur sur le sous-espace engendré par les vecteurs inclus dans la somme. Si tous les vecteurs de la base sont inclus on obtient l'opérateur identité :

$$\sum_{k=1}^N |u_k\rangle\langle u_k| = 1$$

Ainsi les vecteurs d'une base orthonormée vérifient la relation de fermeture.

Réciproquement, tout ensemble de vecteurs orthonormés vérifiant la relation de fermeture forment une base pour l'espace des états

Considérons le produit scalaire du vecteur d'état par lui-même dans le cas où il serait normé à l'unité ($\| |\Psi\rangle \|^2 = \langle \Psi|\Psi\rangle = 1$). On a alors :

$$\langle \Psi|\Psi\rangle = 1$$

En appliquant la relation de fermeture on obtient :

$$\langle \Psi|1|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N \langle \Psi|u_k\rangle\langle u_k|\Psi\rangle$$

Soit :

$$\langle \Psi|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N c_k c_k^*$$

Or le nombre réel $c_k^* c_k$ représente la probabilité de transition du système de l'état $|\Psi\rangle$ vers l'état $|u_k\rangle$. Il est donc nécessaire d'utiliser un vecteur d'état de norme 1 pour que la condition de normalisation des probabilités soit satisfaite.

Définition

On appelle **observable** un opérateur hermitique dont les kets propres forment une base de l'espace des états. Ce type d'opérateur joue un rôle capital en théorie quantique.

VI.7 Représentation matricielle

En adoptant certaines conventions, tous les calculs de la théorie quantique se ramènent aux opérations familières de l'algèbre linéaire.

Dans une base **donnée** $\{|u_i\rangle \mid i = 1, \dots, N\}$, on représente un ket par la matrice colonne :

$$|\Psi\rangle_{\{|u_i\rangle\}} = \begin{pmatrix} \langle u_1 | \Psi \rangle \\ \langle u_2 | \Psi \rangle \\ \vdots \\ \langle u_N | \Psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}$$

Par application de la relation de fermeture, on trouve le développement de $\langle \Psi |$:

$$\langle \Psi |_{\{|u_i\rangle\}} = (c_1^* \quad c_2^* \quad \dots \quad c_N^*)$$

En appliquant les règles du produit matriciel, on retrouve l'expression du produit scalaire dans une base donnée.

Si \hat{A} est un opérateur $\langle u_j | \hat{A} | u_k \rangle$ est un nombre qui dépend de deux indices. On dit que c'est un élément de matrice :

$$\langle u_j | \hat{A} | u_k \rangle = A_{j,k}$$

et

$$\hat{A}_{\{|u_i\rangle\}} = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{N1} & & A_{NN} \end{pmatrix}$$

Considérons l'équation :

$$(46) \quad |\Phi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle$$

On projette (46) sur un vecteur de base :

$$\langle u_j | \Phi \rangle = \langle u_j | \hat{A} | \Psi \rangle \quad j = 1, 2, \dots, N \quad j = 1, 2, \dots, N$$

En appliquant la relation de fermeture :

$$\langle u_j | \Phi \rangle = \sum_{k=1}^N \langle u_j | \hat{A} | u_k \rangle \langle u_k | \Psi \rangle$$

Si le développement de $|\Phi\rangle$ sur $\{|u_i\rangle, i = 1 \dots N\}$ est :

$$|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^N b_k |u_k\rangle$$

On a :

$$b_j = \sum_{k=1}^N A_{jk} c_k$$

Cela signifie que la matrice colonne représentant $|\Phi\rangle$ est obtenue en multipliant la matrice carrée représentant \hat{A} par la matrice colonne représentant $|\Psi\rangle$.

L'élément de matrice d'un produit de deux opérateurs est :

$$\langle u_j | \hat{A} \hat{B} | u_k \rangle = \sum_{i=1}^N \langle u_j | \hat{A} | u_i \rangle \langle u_i | \hat{B} | u_k \rangle$$

La matrice représentant un produit d'opérateurs est donc le produit des matrices qui représentent chacun d'eux.

La polarisation du photon est un degré de liberté interne. L'espace des états de polarisation est de dimension 2. On peut choisir comme états de base les états de polarisations rectilignes $|X\rangle$ et $|Y\rangle$.

$$|\Psi\rangle_{\{|X\rangle,|Y\rangle\}} = \begin{pmatrix} \langle X|\Psi\rangle \\ \langle Y|\Psi\rangle \end{pmatrix} \text{ avec } |X\rangle_{\{|X\rangle,|Y\rangle\}} = \begin{pmatrix} \langle X|X\rangle \\ \langle Y|X\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ et } |Y\rangle_{\{|X\rangle,|Y\rangle\}} = \begin{pmatrix} \langle X|Y\rangle \\ \langle Y|Y\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

VI.8 Amplitudes de localisation

Si à t une particule est « dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ » (décrit par l'état $|\Psi(t)\rangle$) son amplitude de localisation à l'abscisse est :

$$\langle x|\Psi(t)\rangle = \Psi(x, t)$$

Contrairement au cas où les états pourraient être repérés par un indice discret, on a besoin d'une infinité d'amplitude pour définir complètement l'état du système. On peut considérer que l'amplitude de localisation est une fonction de deux variables et qui s'appelle la fonction d'onde

Dans le cas d'une variable aléatoire continue, il est impossible d'attribuer une probabilité finie à chaque valeur précise de celle-ci. Il faut plutôt attribuer une probabilité à un intervalle de valeurs de la variable. On définit la densité de probabilité $g(x, t)$ à partir de la probabilité infinitésimale de trouver la particule à l'instant t entre x et $x + dx$:

$$dP(x, x + dx, t) = g(x, t)dx$$

La probabilité pour que la variable prenne une valeur comprise entre x_1 et x_2 est :

$$P(x_1, x_2, t) = \int_{x_1}^{x_2} g(x, t)dx$$

La condition de normalisation des probabilités s'écrit donc :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x, t)dx = 1$$

Puisque la probabilité est un nombre sans dimension, la densité de probabilité a la dimension inverse de la variable x .

La densité de probabilité est liée à l'amplitude de localisation :

$$g(x, t) = |\langle x|\Psi(t)\rangle|^2 = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)$$

La densité de probabilité de présence est donc le module au carré de la fonction d'onde.

et la condition de normalisation des probabilités s'écrit :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) dx = 1$$

ou bien :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \Psi(t)|x\rangle\langle x|\Psi(t)\rangle dx = 1$$

Si cette condition est remplie $\Psi(x, t)$ est dite normalisée à l'unité.

Si :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\langle x|\Psi(t)\rangle|^2 dx = C$$

Lorsque C est finie, $\Psi(x, t)$ est dite de carré sommable. On peut alors la normaliser à l'unité en divisant par \sqrt{C} . Pour que l'intégrale converge, il est nécessaire que le module de $\Psi(x, t)$ tende vers 0 aux grandes distances. La particule est donc localisée dans une région finie de l'espace. Elle se trouve dans un état lié. Nous verrons que son énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes.

Il existe des situations dans lesquelles la fonction d'onde n'est pas de carré sommable. Tout l'espace est alors accessible à la particule. Les énergies possibles remplissent un continuum.

VI.9 Postulats de la théorie quantiques

Cinq postulats permettent de donner un contenu au formalisme de la physique quantique.

1°) L'état du système physique à un instant t est complètement défini par la donnée de son vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$

2°) A toute grandeur physique mesurable \mathcal{A} , on associe une observable \hat{A}

3°) La mesure d'une grandeur physique \mathcal{A} ne peut donner comme résultats que l'une des valeurs propres de l'observable associé \hat{A} .

4°) Lors de la mesure d'une grandeur physique \mathcal{A} d'un système dans un état $|\Psi(t)\rangle$ normé à l'unité, la probabilité d'obtenir comme résultat une valeur propre a_n donnée non dégénérée est égale à la probabilité de transition de l'état $|\Psi(t)\rangle$ vers l'état propre associé $|\phi_n\rangle$: $|\langle\phi_n|\Psi(t)\rangle|^2$.

5°) Si la valeur propre est non dégénérée, l'état du immédiatement après la mesure ayant donné la valeur propre est l'état propre lui correspondant.

Ainsi le postulat 1°) signifie que la donnée de $|\Psi(t)\rangle$ permet de fournir une réponse à toute question posée expérimentalement.

2°) Une observable est un opérateur hermitique dont les vecteurs propres forment une base pour l'espace des états.

4°) La probabilité pour trouver une valeur propre particulière se confond avec la probabilité pour trouver le système dans l'état propre correspondant.

Supposons que les kets $\{|u_k\rangle \ k = 1, \dots, N\}$ soient kets propres de \hat{A} avec les valeurs propres de a_k :

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N \langle\Psi|\hat{A}|u_k\rangle\langle u_k|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_k \langle\Psi|u_k\rangle\langle u_k|\Psi\rangle$$

d'où : $\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^N a_k P(a_k)$

où $P(a_k)$ est la probabilité de trouver la valeur propre a_k . Le nombre correspondant est donc la valeur moyenne de la grandeur physique représentée par l'observable \hat{A} dans l'état $|\Psi\rangle$.

$$\langle\hat{A}\rangle_\Psi = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle$$

VI.10 Mesure de deux grandeurs physiques

Le processus de mesure perturbe le système et peut provoquer un changement d'état du système étudié. Le seul cas pour lequel le résultat peut être prédit avec certitude est celui pour lequel le système est déjà dans un état propre de l'observable correspondant à la grandeur physique mesurée. En effet si :

$$|\Psi\rangle = |u_k\rangle$$

tous les autres coefficients de développement sur les états $|u_l\rangle$ ($l \neq k$) sont nuls. En conséquence une répétition de la mesure immédiatement après la première mesure donnera avec certitude le même résultat. L'immédiateté a une importance car le système pourrait évoluer (s'il n'était pas parfaitement isolé) et ne pas rester dans l'état $|u_k\rangle$.

Soient \hat{A} et \hat{B} deux observables associées à des grandeurs à mesurer. Par définition leur commutateur est :

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

S'il est nul on a $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ et on dit que les observables commutent.

Soit $|\Phi\rangle$ un ket propre de \hat{A} associé à la valeur propre a :

$$\hat{A}|\Phi\rangle = a|\Phi\rangle$$

et :

$$\hat{B}\hat{A}|\Phi\rangle = a\hat{B}|\Phi\rangle$$

Si \hat{A} et \hat{B} commutent on peut donc écrire :

$$\hat{A}\hat{B}|\Phi\rangle = a\hat{B}|\Phi\rangle$$

$\hat{B}|\Phi\rangle$ est ket propre de \hat{A} associé à la valeur propre a . Or par hypothèse, il y a un seul ket propre de \hat{A} correspondant à cette valeur propre. $|\Phi\rangle$ et $\hat{B}|\Phi\rangle$ sont proportionnels c'est-à-dire :

$$\hat{B}|\Phi\rangle = b|\Phi\rangle$$

Ainsi le ket propre de \hat{A} est aussi ket propre de \hat{B} . La même conclusion s'applique à chacun des kets propres de \hat{A} qui par hypothèse forment une base de l'espace des états. On peut donc conclure que si \hat{A} et \hat{B} commutent, **ils possèdent une base commune de vecteurs propres.**

Il est facile de montrer que réciproquement si \hat{A} et \hat{B} ont une base de vecteurs propres communs, ils commutent. On a alors :

$$\hat{A}|u_k\rangle = a_k|u_k\rangle$$

$$\hat{B}|u_k\rangle = b_k|u_k\rangle$$

Soit $|\Psi\rangle$ un ket quelconque de \mathcal{E} . On peut dire que \hat{A} et \hat{B} commutent si la relation

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle$$

est toujours vérifiée.

Or par hypothèse :

$$\hat{A}\hat{B}|u_k\rangle = \hat{A}(b_k|u_k\rangle) = a_k b_k |u_k\rangle$$

$$\hat{B}\hat{A}|u_k\rangle = \hat{B}(a_k|u_k\rangle) = a_k b_k |u_k\rangle$$

La relation de fermeture permet d'écrire :

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N \hat{A}\hat{B}|u_k\rangle \langle u_k|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N a_k b_k |u_k\rangle \langle u_k|\Psi\rangle$$

et

$$\hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N \hat{B}\hat{A}|u_k\rangle \langle u_k|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^N b_k a_k |u_k\rangle \langle u_k|\Psi\rangle$$

On peut donc conclure que si les observables \hat{A} et \hat{B} ont une base de vecteurs propres communs ils commutent.

Soient \hat{A} et \hat{B} deux observables qui commutent. Supposons que la mesure de la grandeur physique représentée par \hat{A} donne le résultat a_k . L'état du système immédiatement après la mesure est $|u_k\rangle$. Or cet état est ket propre de l'observable \hat{B} avec comme valeur propre b_k . La mesure de la grandeur physique correspondante effectuée immédiatement après celle qui est représentée par \hat{A} donne avec certitude le résultat b_k et l'état du système reste $|u_k\rangle$.

Des nouvelles mesures de ces grandeurs donneront les mêmes résultats. On dit alors que ces grandeurs physiques sont compatibles.

Si les observables associées à deux grandeurs physiques ne commutent pas leurs vecteurs propres sont en général différents et les résultats obtenus **en mesurant successivement ces deux grandeurs dépendent de l'ordre dans lequel on fait la mesure**. Si la grandeur associée à \hat{A} est mesurée d'abord et le résultat obtenu est a_k , l'état du système immédiatement après cette mesure est $|u_k\rangle$. En général il n'est pas un état propre de \hat{B} . Si $|v_j\rangle$ l'est, il n'est pas en général un état propre de \hat{A} . Une nouvelle mesure de cette grandeur ne donne donc pas nécessairement le même résultat que la première. Ainsi l'information obtenue dans une mesure peut être détruite en mesurant une grandeur incompatible.

VII OPERATEUR D'EVOLUTION ET EQUATION DE SCHRÖDINGER

L'opérateur d'évolution $\hat{U}(t_2, t_1)$ associe au ket $|\Psi(t_1)\rangle$ représentant l'état d'un système au temps t_1 un autre ket, noté $|\Psi(t_2)\rangle$, représentant l'état du même système au temps t_2 . On peut donc écrire :

$$|\Psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle$$

Dans l'espace dual s'écrit :

$$\langle\Psi(t_2)| = \langle\Psi(t_1)|\hat{U}^\dagger(t_2, t_1)$$

Pour que la norme du vecteur d'état se conserve au cours du temps il faut que l'opérateur d'évolution soit unitaire. En effet, on a :

$$\langle\Psi(t_2)|\Psi(t_2)\rangle = \langle\Psi(t_1)|\hat{U}^\dagger(t_2, t_1)\hat{U}(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle$$

Si \hat{U} est unitaire on a bien :

$$\langle\Psi(t_2)|\Psi(t_2)\rangle = \langle\Psi(t_1)|\Psi(t_1)\rangle$$

Il est évident que $\hat{U}(t, t)$ est l'opérateur identité. En conséquence $\hat{U}(t + dt, t)$ pour un dt infinitésimal est un opérateur peu différent de l'identité qu'on peut écrire sous la forme :

$$\hat{U}(t + dt, t) = \hat{1} + \hat{K}(t)dt$$

L'unitarité de l'opérateur d'évolution implique la condition :

$$\hat{1} = (\hat{1} + \hat{K}dt)(\hat{1} + \hat{K}^\dagger dt) = \hat{1} + (\hat{K} + \hat{K}^\dagger)dt + O(dt)$$

Le terme de second ordre étant négligeable et \hat{U} étant unitaire, cela conduit à :

$$(\hat{K} + \hat{K}^\dagger) = \hat{0}$$

L'opérateur \hat{K} est donc anti-hermitique et homogène à l'inverse d'un temps. Il est plus commode de faire intervenir un opérateur hermitique \hat{H} car il possède des propriétés plus intéressantes.

$$\text{Posons :} \quad \hat{K} = \hat{H}/(i\hbar)$$

L'adjoint est donné par :

$$\hat{K}^\dagger = \frac{\hat{H}^\dagger}{(-i\hbar)} = \frac{\hat{H}}{(-i\hbar)} = -\hat{K}$$

L'opérateur \hat{H} est homogène à une énergie. On l'appelle opérateur hamiltonien.

Nous allons maintenant obtenir l'équation différentielle vérifiée par le vecteur d'état. L'application de l'opérateur d'évolution au vecteur d'état donne la relation :

$$\hat{U}(t + dt, t)|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t + dt)\rangle$$

soit :

$$\left(\hat{1} + \frac{\hat{H}}{i\hbar}dt\right)|\Psi(t)\rangle = |\Psi(t + dt)\rangle$$

$$\hat{H}dt|\Psi(t)\rangle = i\hbar[|\Psi(t + dt)\rangle - |\Psi(t)\rangle]$$

et finalement l'équation différentielle :

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

C'est l'équation de Schrödinger (dépendante du temps). Elle est écrite ici sous une forme abstraite mais très générale.

On postule donc :

6°) L'évolution temporelle de $|\Psi(t)\rangle$ décrivant l'état du système au temps t est régie par :

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

où $\hat{H}(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système.

VII.1 Equation de Schrödinger dans une base donnée

On choisit des états de base dont le choix arbitraire nous permet d'appréhender le comportement du système.

Supposons que l'ensemble des vecteurs $\{|u_k\rangle\}$ forme une base orthonormée de l'espace des états. En projetant l'équation de Schrödinger sur un vecteur de base donné il vient :

$$\langle u_k | \hat{H} | \Psi(t) \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \langle u_k | \Psi(t) \rangle$$

En utilisant la relation de fermeture :

$$\sum_{l=1}^N \langle u_k | \hat{H} | u_l \rangle \langle u_l | \Psi(t) \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \langle u_k | \Psi(t) \rangle$$

soit :

$$\sum_{l=1}^N \hat{H}_{kl} c_l(t) = i\hbar \frac{d}{dt} c_k(t)$$

Les amplitudes d'état vérifient donc un système d'équations différentielles couplées du premier ordre par rapport à t . La donnée des amplitudes à $t = 0$ permet donc de les déterminer à tout instant ultérieur. Ainsi lorsque l'état est connu à un instant donné l'équation de Schrödinger permet de le connaître à tout instant ultérieur.

VII.2 Etats stationnaires

Soit $\{|\Phi_k\rangle\}$ une base orthonormée de kets propres du l'hamiltonien. Nous supposons que toutes les valeurs propres de \hat{H} sont non dégénérées. On a donc :

$$\hat{H}|\Phi_k\rangle = E_k|\Phi_k\rangle \quad E_k \text{ et } |\Phi_k\rangle \text{ ne dépendent pas du temps.}$$

\hat{H} étant une observable et ses valeurs propres étant non dégénérées, on développe $|\Psi(t)\rangle$ sur la base des vecteurs propres de \hat{H} :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t) |\Phi_k\rangle$$

Toute la dépendance temporelle de $|\Psi(t)\rangle$ est contenue dans les amplitudes d'états $c_k(t)$. L'équation de Schrödinger donne :

$$\langle \Phi_k | \hat{H} | \Psi(t) \rangle = i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Phi_k | \Psi(t) \rangle$$

\hat{H} étant hermitique :

$$\langle \Phi_k | \hat{H} = E_k \langle \Phi_k |$$

Ainsi 0 donne :

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_k(t) = E_k c_k(t)$$

Le Hamiltonien est bien diagonal dans la base de ses vecteurs propres (valeurs propres non dégénérées).

Dans le cas d'un système à deux états de base et en représentation matricielle dans la base des états solutions de \hat{H} (états stationnaires) :

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \text{ avec } E_i = \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_i \rangle$$

Le Hamiltonien joue cependant un rôle privilégié car c'est le générateur de l'évolution temporelle. Lorsqu'il est diagonal les équations d'évolution des amplitudes sont découplées. Dans le cas particulier d'un système à deux états de base l'équation de Schrödinger s'écrit :

On a donc deux équations différentielles indépendantes :

$$E_1 c_1(t) = i\hbar \frac{d}{dt} c_1(t)$$

$$E_2 c_2(t) = i\hbar \frac{d}{dt} c_2(t)$$

Elles s'intègrent facilement et les solutions sont données par :

$$c_1(t) = c_1(0) e^{-iE_1 t/\hbar}$$

$$c_2(t) = c_2(0) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

Les probabilités pour trouver le système dans les deux états sont données respectivement par :

$$P_1 = c_1(t)^* c_1(t) = c_1(0)^* c_1(0)$$

$$P_2 = c_2(t)^* c_2(t) = c_2(0)^* c_2(0)$$

Elles sont indépendantes du temps ce qui justifie l'appellation d'états stationnaires pour ces états qui diagonalisent l'opérateur Hamiltonien. En effet, si à $t = 0$ le système se trouve dans l'état $|\Phi_1\rangle$ il y reste indéfiniment.

Lorsqu'un système est dans un état stationnaire, c'est-à-dire un état propre de son opérateur Hamiltonien, une mesure de son énergie donne certainement la valeur propre correspondant à ce ket propre. L'énergie du système est donc bien définie. C'est un cas limite de la relation d'indétermination temps-énergie : ΔE tend vers zéro et la durée tend vers l'infini.

Ainsi dans la base des états propres de \hat{H} les équations d'évolution des amplitudes sont découplées et celles-ci ne varient que par un facteur de phase dans le temps. Le problème à résoudre dans le cas général est donc la recherche des états propres de \hat{H} .

VII.3 Recherche systématique des états stationnaires

Supposons que les N vecteurs $\{|u_k\rangle, k = 1 \text{ à } N\}$ forment une base de l'espace des états d'un système. Les états stationnaires sont notés $|\Phi_k\rangle$.

Tout état du système peut être développé sur la base choisie :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k b_k(t) |u_k\rangle$$

Si le système est initialement dans un état stationnaire particulier, $|\Phi_1\rangle$ par exemple, on a :

$$|\Psi(0)\rangle = |\Phi_1\rangle$$

et

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} |\Phi_1\rangle$$

soit :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar} |\Psi(0)\rangle$$

Ainsi, l'évolution temporelle d'un état stationnaire se traduit simplement par la multiplication du vecteur d'état par un facteur de phase.

Lorsqu'un état stationnaire est développé sur une base donnée il faut donc que toutes les amplitudes d'état varient de la même manière dans le temps. La recherche d'un état stationnaire $|\Phi_k\rangle$ d'énergie E_k équivaut donc à chercher une solution de l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$c_l(t) = c_l(0) e^{-iE_k t/\hbar} \quad l = 1, 2 \text{ à } N$$

où E_k est l'énergie de l'état stationnaire recherché $|\Phi_k\rangle$.

On a alors :

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_l(t) = E_k c_l(t)$$

et l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\sum_{m=1}^N \hat{H}_{lm} c_m(t) = E_k c_l(t)$$

ou :

$$\sum_{m=1}^N \hat{H}_{lm} c_m(0) = E_k c_l(0)$$

Les énergies possibles sont donc les valeurs propres de l'opérateur Hamiltonien et les vecteurs propres ont comme composantes les amplitudes donnant le développement de l'état stationnaire sur la base des $|u_l\rangle$. L'équation précédente est appelée équation de Schrödinger indépendante du temps ou équation aux valeurs propres.

Dans le cas particulier d'un système à deux états de base. L'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit :

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

soit :

$$\begin{pmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ce système d'équations admet des solutions non triviales à la condition que le déterminant de la matrice des coefficients s'annule. Il faut donc avoir :

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

Les valeurs possibles de E sont solutions de l'équation quadratique :

$$E^2 - (H_{11} + H_{22})E + H_{11}H_{22} - H_{12}H_{21} = 0$$

Le discriminant est donné par :

$$\Delta = (H_{11} + H_{22})^2 - 4 H_{11}H_{22} + 4 H_{12}H_{21} \text{ avec } (H_{12})^* = H_{21}$$

soit :

$$\Delta = (H_{11} - H_{22})^2 + 4 |H_{12}|^2 \text{ soit } \Delta > 0$$

On a donc :

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4 |H_{12}|^2}$$

Remarquons enfin que la somme des énergies des états stationnaires est égale à la trace de H et que leur produit est égal à son déterminant.

Connaissant l'état $|\Psi(0)\rangle$ décrivant l'état du système à l'instant $t = 0$. Pour connaître l'état $|\Psi(t)\rangle$ à l'instant t , on procède systématiquement de la manière suivante :

1°) On développe $|\Psi(0)\rangle$ sur la base des états propre de \hat{H} :

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_l c_l(0) |\Phi_l\rangle \text{ avec } c_l(0) = \langle \Phi_l | \Psi(0) \rangle \text{ et } \hat{H} |\Phi_l\rangle = E_l |\Phi_l\rangle$$

1°) On calcule alors $|\Psi(t)\rangle$ pour tout t en multipliant chaque coefficient $c_l(0)$ par $e^{-iE_l t/\hbar}$: $|\Psi(t)\rangle = \sum_l c_l(0) e^{-iE_l t/\hbar} |\Phi_l\rangle$

VII.4 Constantes du mouvement

La valeur moyenne d'une grandeur physique est donnée par :

$$\langle \hat{A} \rangle_\Psi = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle$$

Sa dérivée par rapport au temps s'écrit :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_\Psi = \left(\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right) \hat{A} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \hat{A} \left(\frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \right)$$

La variation temporelle de cette grandeur peut être due à une dépendance explicite sur le temps ainsi qu'à une évolution de l'état du système. A l'aide de l'équation de Schrödinger :

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

et de l'équation correspondante dans l'espace dual :

$$\langle \Psi(t) | \hat{H} = -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) |$$

On obtient :

$$i\hbar \langle \hat{A} \rangle_\Psi = -\langle \Psi(t) | \hat{H} \hat{A} | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \hat{A} \hat{H} | \Psi(t) \rangle + i\hbar \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle$$

soit :

$$i\hbar \langle \hat{A} \rangle_\Psi = \langle \Psi(t) | [\hat{A}, \hat{H}] | \Psi(t) \rangle + i\hbar \langle \Psi(t) | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \Psi(t) \rangle$$

c'est-à-dire :

$$i\hbar\langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle_\psi + i\hbar\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle_\psi$$

Si une observable ne dépend pas explicitement du temps et si elle commute avec le Hamiltonien alors sa valeur moyenne ne dépend pas du temps : on dit qu'elle représente une grandeur physique qui est une constante du mouvement.

VII.5 Exemple : système à deux états

VII.5.1 L'ion moléculaire H_2^+

L'ion moléculaire H_2^+ est constitué de deux protons et un électron. Si l'électron est au voisinage d'un des protons, le système peut être considéré comme étant la superposition d'un atome d'hydrogène interagissant avec un proton. Si la distance internucléaire tend vers l'infini le proton et l'atome d'hydrogène sont supposés isolés. Le système H_2^+ possède un grand nombre d'états de translation, de rotation et de vibration. C'est la raison pour laquelle nous supposons que la molécule est au repos c'est-à-dire que les énergies de translation, rotation et de vibrations sont aussi basses que possibles (cas limite : elles sont nulles). Dans ce cas, il reste encore deux états possibles selon que l'électron se trouve au voisinage du premier ou du second proton. Nous notons $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$ ces deux états et nous supposons



Examinons la forme de l'énergie potentielle électrostatique au voisinage de la mi-distance entre les deux protons.

A mi-distance, la somme vectorielle de forces électrostatiques exercées par les deux H^+ sur l'électron est nulle car les 2 forces se compensent exactement donc $\frac{\partial V}{\partial x} = 0$. L'énergie potentielle V présente un extremum. Afin de déterminer s'il s'agit d'un maximum ou d'un minimum, on écarte l'électron de cette position. L'électron est alors attiré par le proton le plus proche. La mi-distance est donc un maximum local car il ne correspond pas à une position d'équilibre.

Si $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$ étaient stationnaires, c'est à dire si l'amplitude de probabilité que l'électron passe d'un proton à un autre, il correspondrait à la même énergie compte tenu de la symétrie du système. On a donc :

$$H_{11} = \langle u_1 | H | u_1 \rangle = H_{22} = \langle u_2 | H | u_2 \rangle = E_0$$

où E_0 correspond à l'énergie d'un atome d'hydrogène à laquelle s'ajoute celle d'un proton.

Il existe une amplitude de probabilité de transition que l'électron franchisse la barrière d'énergie potentielle par effet tunnel. Par conséquent $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$ ne sont pas stationnaires et le Hamiltonien n'est pas diagonal dans cette base.

Nous posons $H_{12} = H_{21} = -a$. Ainsi :

$$H_{\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}} = \begin{pmatrix} E_0 & -a \\ -a & E_0 \end{pmatrix} \text{ avec } a > 0$$

Recherchons les valeurs propres du Hamiltonien H et les états propres (états stationnaires) :

$$\det|H - \lambda I| = \begin{vmatrix} E_0 - \lambda & -a \\ -a & E_0 - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_0 - \lambda)^2 - a^2 = 0$$

$$(E_0 - \lambda + a)(E_0 - \lambda - a) = 0$$

Donc $\lambda = E_0 \pm a$ sont les énergies des nouveaux états stationnaires.

Recherchons le développement de l'état propre $|\varphi_a\rangle$ (resp. $|\varphi_b\rangle$) associé à la valeur propre $E_0 - a$ (resp. $E_0 + a$) dans la base des états $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$.

En notation matricielle dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle\}$, on cherche donc les composantes x et y telles que :

$$\begin{pmatrix} E_0 & -a \\ -a & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = (E_0 - a) \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \text{ avec } |\varphi_a\rangle = x|u_1\rangle + y|u_2\rangle$$

On obtient $x = y$. En normalisant l'état $|\varphi_a\rangle$, on trouve :

$$(47) \quad |\varphi_a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle + |u_2\rangle)$$

De même, on obtient :

$$(48) \quad |\varphi_b\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle - |u_2\rangle).$$

L'état $|\varphi_a\rangle$ possède une énergie inférieure à celle d'un proton séparé à l'infini d'un atome d'hydrogène (E_0) et l'énergie de liaison est numériquement égale à l'élément non diagonal du Hamiltonien H .

L'amplitude de localisation pour l'état $|\Phi_a\rangle$ est $\Phi_a(\vec{r})$ avec :

$$\Phi_a(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle \vec{r}|u_1\rangle + \langle \vec{r}|u_2\rangle)$$

Or par hypothèse $\langle \vec{r}|u_1\rangle$ (resp. $\langle \vec{r}|u_2\rangle$) est une fonction qui présente des valeurs importantes pour des valeurs de \vec{r} correspondant à une localisation de l'électron au voisinage du premier (resp. second) proton.

Si l'état de l'électron est décrit par $|\varphi_a\rangle$, l'électron possède la même AP de se trouver au voisinage du premier ou du second proton. Puisque l'électron possède une AP non nulle de passer d'un proton à l'autre, l'électron possède une AP non nulle entre les protons : son AP de localisation est donc symétrique par rapport au plan $x = 0$. Comme elle est associée à l'état lié, on dit que l'AP de localisation est liante. On parle d'orbitale liante.

Si l'électron est dans l'état $|\varphi_b\rangle$ l'électron possède la même AP de se trouver au voisinage du premier ou du second proton au signe près. L'amplitude de localisation est donc une fonction antisymétrique par rapport au plan $x = 0$. On dit que $\Phi_b(\vec{r})$ est une orbitale antiliante car son énergie est supérieure à celle d'un proton et d'un atome d'hydrogène isolé.

Cependant que l'électron soit dans l'état $|\varphi_a\rangle$ ou $|\varphi_b\rangle$, il possède la même probabilité de se trouver au voisinage de l'un ou l'autre des protons.

On souhaite déterminer la variation temporelle $|u_1\rangle$ des AP $c_1(t)$ et $c_2(t)$ de trouver le système dans l'état $|u_1\rangle$ respectivement $|u_2\rangle$ sachant qu'à $t = 0$ le système est dans l'état $|\Psi(t = 0)\rangle = |u_1\rangle$.

On développe l'état $|\Psi(t)\rangle$ sur la base des états stationnaires $\{|\varphi_a\rangle, |\varphi_b\rangle\}$ car on sait comment évoluent les amplitudes des états stationnaires.

On fait donc agir la relation de fermeture $|\varphi_a\rangle\langle\varphi_a| + |\varphi_b\rangle\langle\varphi_b| = \hat{1}$ sur l'état $|\Psi(t)\rangle$.

$$|\Psi(t)\rangle = |\varphi_a\rangle\langle\varphi_a|\Psi(t)\rangle + |\varphi_b\rangle\langle\varphi_b|\Psi(t)\rangle = c_a(t)|\varphi_a\rangle + c_b(t)|\varphi_b\rangle$$

On connaît la forme des amplitudes d'états $c_a(t)$ et $c_b(t)$:

$$|\Psi(t)\rangle = c_a(0)e^{-iE_a t/\hbar}|\varphi_a\rangle + c_b(0)e^{-iE_b t/\hbar}|\varphi_b\rangle = c_a(0)e^{-i(E_0-a)t/\hbar}|\varphi_a\rangle + c_b(0)e^{-i(E_0+a)t/\hbar}|\varphi_b\rangle$$

$$(49) \quad |\Psi(t)\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} [c_a(0)e^{iat/\hbar}|\varphi_a\rangle + c_b(0)e^{-iat/\hbar}|\varphi_b\rangle]$$

Or à $t=0$:

$$(50) \quad |\Psi(t=0)\rangle = |u_1\rangle$$

En identifiant (49) et (50) on obtient :

$$|u_1\rangle = c_a(0)|\varphi_a\rangle + c_b(0)|\varphi_b\rangle$$

Développons l'état $|u_1\rangle$ sur les états stationnaires afin de déterminer par identification les amplitudes d'état $c_a(0)$ et $c_b(0)$. D'après (47) et (48), on a :

$$|\varphi_a\rangle + |\varphi_b\rangle = \sqrt{2}|u_1\rangle \text{ soit } |u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi_a\rangle + |\varphi_b\rangle)$$

Cela entraîne :

$$c_a(0) = c_b(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

soit :

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{e^{-iE_0 t/\hbar}}{\sqrt{2}} [e^{iat/\hbar}|\varphi_a\rangle + e^{-iat/\hbar}|\varphi_b\rangle]$$