



Université Hassan II de Casablanca

Faculté des sciences et techniques de Mohammed VI

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

SUPPORT DU COURS

Mécanique quantique

Préparé par Pr. **Mohamed BENCHEIKH**

*La physique est définitivement
constituée dans ses concepts
fondamentaux ; tout ce qu'elle peut
désormais apporter, c'est la
détermination précise de quelques
décimales supplémentaires.*

*Il y a bien deux petits problèmes :
celui du résultat négatif de
l'expérience de Michelson et celui du
corps noir, mais ils seront rapidement
résolus et n'altèrent en rien notre
confiance...*

Lord Kelvin

En 1892

Préambule

Ce support du cours est destiné aux étudiants de la 2^{ème} année universitaire parcours MIP à la faculté des sciences et techniques (FST) de Mohammedia, Université Hassan II de Casablanca.

Les objectifs de ce cours :

- Approfondir les concepts de base et se familiariser avec les outils mathématiques de la mécanique quantique.
- Connaître les concepts de base de la mécanique quantique en les appliquant à des systèmes quantiques concrets.
- Se familiariser avec l'équation de Schrödinger en tant que base fondamentale de la mécanique quantique et savoir la résoudre et l'appliquer.
- S'initier aux méthodes de calcul de la mécanique quantique par application détaillée sur quelques exemples quantiques comme l'oscillateur harmonique.

Ce manuscrit est une référence pour le module de la mécanique quantique il n'est pas exhaustif. Les étudiants sont priés de voir d'autres références pour élargir leurs connaissances et par conséquent de construire une base rigide en physique fondamentale.

Professeur Mohamed BENCHEIKH

Département de Physique
Faculté des sciences et techniques (FST)
de Mohammedia
Université Hassan II de Casablanca

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 Les Notions Mathématiques utiles en Mécanique Quantique	2
1.1 Série de Fourier	2
1.1.1 Fonctions périodiques	2
1.1.2 Développement en série de Fourier	2
1.1.2.1 Définition	2
1.1.2.2 Égalité de Bessel-Parseval.....	3
1.2 Transformation de Fourier	3
1.2.1 Définition :	3
1.2.2 Propriétés.....	4
1.2.3 Formule de Parseval-Plancherel	4
1.2.4 Transformation de Fourier dans l'espace à 3 D.....	5
1.3 Fonction δ de Dirac	5
1.3.1 Définition	5
1.3.2 Fonctions tendent vers δ	6
1.3.3 Propriétés de δ	6
1.3.4 Transformée de Fourier de δ	7
1.3.5 Dérivée de δ	7
1.3.6 La fonction δ dans l'espace à 3 D	7
Chapitre 2 Introduction à la mécanique quantique.....	9
2.1 Historique de la mécanique quantique	9
2.2 Aspect corpusculaire du rayonnement	10
2.2.1 Rayonnement du corps noir.....	10
2.2.1.1 Définition	10
2.2.1.2 Expérience :	10
2.2.1.3 Interprétation classique :	11
2.2.1.4 Hypothèse de Planck (1900) :	12
2.2.1.5 Conclusion :	12
2.2.2 Effet photoélectrique	13
2.2.2.1 Expérience.....	13
2.2.2.2 Interprétation quantique :	14
2.2.2.3 Conclusion.....	15
2.2.2.4 Application	15
2.2.3 Effet Compton (1923)	15
2.2.3.1 Expérience.....	16
2.2.3.2 Interprétation théorique	16

2.2.3.3	Conclusion :	18
2.3	Aspect ondulatoire du rayonnement.....	18
2.4	La quantification de la structure électronique de l'atome	20
2.4.1	Modèle classique (Rutherford 1911)	20
2.4.2	Modèle semi quantique ou le modèle de Bohr	21
2.4.3	Postulats de Bohr.....	21
Chapitre 3	Aspect ondulatoire de la matière et fonction d'onde	25
3.1	Hypothèse de De Broglie.....	25
3.2	Confirmation expérimentale de l'hypothèse de De Broglie	25
3.3	La fonction d'onde	26
3.4	Interprétation de la fonction d'onde.....	26
3.4.1	Fonction d'onde associée à une particule	27
3.4.2	Onde plane	27
3.4.3	Paquet d'ondes	28
3.4.4	Vitesse de phase – Vitesse de groupe	28
3.4.5	Principe d'incertitude d'Heisenberg.....	29
Chapitre 4	Équation de Schrödinger	31
4.1	Introduction :.....	31
4.2	Conditions imposées	31
4.3	Établissement de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.....	32
4.4	Équation de Schrödinger indépendante du temps.....	33
4.4.1	Équation de Schrödinger à une dimension	34
4.4.2	Cas où $V(x) = 0$	35
4.4.3	Particule dans un puits de potentiel	36
Chapitre 5	Formalisme mathématique de la mécanique quantique	39
5.1	Introduction	39
5.2	Espace des fonctions d'onde d'une particule	39
5.2.1	Définition	39
5.2.2	Structure de l'espace \mathcal{L} des fonctions d'onde	40
5.2.2.1	Définition :	40
5.2.2.2	Produit scalaire.....	40
5.2.3	Base orthonormée complète discrète de \mathcal{L}	40
5.2.4	Base orthonormée complète continue de \mathcal{L}	41
5.2.5	Composantes de $\psi(x)$	41
5.2.6	Exemples de Bases continues.....	42
5.2.6.1	Les fonctions delta	42
5.2.6.2	Les ondes planes :	42
5.3	Espace d'états - Notations de Dirac	43

5.3.1	Définition	43
5.3.2	Vecteur « bra » et vecteur « ket »	43
5.3.3	Correspondance entre ket et bra	44
5.3.4	Extension à ξ des différentes notions définies sur \mathcal{E}	44
5.4	Opérateurs linéaires	44
5.4.1	Définition	44
5.4.2	Produit de deux operateurs – Commutateur	45
5.4.3	Représentation d'un opérateur par une matrice	45
5.4.4	Exemple d'opérateur linéaire : Le projecteur	46
5.4.5	Relation de fermeture	46
5.4.6	Application de la relation de fermeture : changement de base	47
5.4.6.1	Transformation des composantes d'un vecteur :	47
5.4.6.2	Transformation des éléments de matrice d'un opérateur A :	47
5.5	Opérateurs adjoints.....	48
5.5.1	Définitions.....	48
5.5.2	Propriétés.....	48
5.5.3	Règles de conjugaison	49
5.6	Opérateurs hermétiques	49
5.6.1	Définitions.....	49
5.6.2	Vecteurs propres et valeurs propres d'un operateur.....	50
5.6.2.1	Définition	50
5.6.2.2	Équation caractéristique	50
5.6.3	Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur hermétique.....	51
5.6.3.1	Les valeurs propres d'un opérateur hermétique sont réelles.....	51
5.6.3.2	Deux vecteurs propres correspondant à des valeurs propres différentes sont orthogonaux.....	51
5.7	Observables.....	51
5.7.1	Définitions.....	51
5.7.2	Exemples d'observables :	52
5.7.2.1	Le projecteur $P\psi$:	52
5.7.2.2	Opérateur P :	52
5.7.3	Observables qui commutent	52
5.8	Opérateurs unitaires	53
5.8.1	Définition	53
5.8.2	Transformation sur les vecteurs.....	54
5.8.3	Transformation sur les operateurs	54
5.9	Produit tensoriel d'espaces d'états.....	55
5.9.1	Définition	55
5.9.2	Propriétés.....	55
5.9.3	Composantes d'un vecteur produit.....	56
5.9.4	Produit scalaire dans ξ	56
5.9.5	Produit tensoriel de deux operateurs A (1) et B (2)	56
5.9.6	États propres et valeurs propres de $A(1)$	56
5.9.7	États propres et valeurs propres de $A(1) + B(2)$	57
Chapitre 6	Postulats de la mécanique quantique.....	58
6.1	Introduction :.....	58

6.2	Énoncé de postulats	58
6.2.1	Description de l'état physique	58
6.2.2	Description des grandeurs physiques	59
6.2.3	Mesure des grandeurs physiques	59
6.2.3.1	Résultats possibles.....	59
6.2.3.2	Principe de décomposition spectrale	59
6.2.3.3	Réduction du paquet d'onde	60
6.2.4	Évolution des systèmes dans le temps	61
6.2.5	Règles de quantification	61
6.3	Interprétation du contenu physique des postulats.....	62
6.3.1	Interprétation probabiliste de ψ	62
6.3.2	Quantification de certaines grandeurs physiques	62
6.3.3	Valeur moyenne d'une observable.....	63
6.3.4	Conservation de la norme	63
6.3.5	Évolution de la valeur moyenne d'une observable	63
6.3.6	Constantes du mouvement.....	64
Chapitre 7	Oscillateur harmonique linéaire à une dimension	65
7.1	L'oscillateur harmonique en mécanique classique	65
7.2	L'oscillateur harmonique en mécanique quantique	66
7.2.1	Valeurs propres de H	66
7.2.1.1	Détermination du spectre de H	67
7.2.1.2	Interprétation des opérateurs a et $a +$	68
7.2.2	États propres de H	68
7.2.3	Fonctions d'onde associées aux états stationnaires	69
7.3	Comparaison entre l'oscillateur classique et quantique	69
Eléments de la bibliographie.....		71

Introduction générale

La mécanique quantique est la théorie mathématique et physique décrivant la structure et l'évolution dans le temps et l'espace des phénomènes physiques à l'échelle de l'atome et en dessous. Elle a été découverte lorsque les physiciens ont voulu décrire le comportement des atomes et les échanges d'énergie entre la lumière et la matière à cette échelle et dans tous les détails.

Plusieurs noms lui sont associés, et en tout premier lieu Planck et Einstein, qui furent les premiers à comprendre que les échanges d'énergie lumineuse, puis l'énergie elle-même, ne pouvaient exister que sous forme quantifiée à l'occasion de leurs travaux sur le rayonnement du corps noir et l'effet photoélectrique. Bohr étendit les postulats quantiques de Planck et d'Einstein de la lumière à la matière, en proposant un modèle reproduisant le spectre de l'atome d'hydrogène.

Pas à pas, des règles furent trouvées pour calculer les propriétés des atomes, des molécules et de leurs interactions avec la lumière lorsque. Toute une série de travaux de plusieurs physiciens et mathématiciens comme De Broglie, Schrödinger, Heisenberg et d'autres, donnèrent corps à des théories générales applicables à ces problèmes.

Le cœur de la mécanique quantique repose sur l'utilisation d'amplitudes de probabilité pour caractériser tous les processus physiques possibles en mécanique quantique. Ce sont ces processus qui peuvent se propager sous forme d'onde, mais les grandeurs physiques associées à ces processus sont souvent quantifiées et donc discrètes. C'est le cas de l'énergie des électrons dans un atome. L'équation fondamentale de la mécanique quantique est l'équation de Schrödinger.

Le monde quantique est étrange, le flou probabiliste y règne, et au fond, il indique une structure sous-jacente aux phénomènes qui est au-delà de l'espace et du temps. C'est ce que semblent montrer l'intrication quantique et l'effet EPR. L'émergence d'un monde classique à partir d'un monde quantique n'est toujours pas bien comprise. C'est un des objets de la théorie de la décohérence que d'expliquer cette émergence.

Futura sciences

Chapitre 1 Les Notions Mathématiques utiles en Mécanique Quantique

1.1 Série de Fourier

1.1.1 Fonctions périodiques

Une fonction $f(x)$ est dite périodique s'il existe une valeur réelle non nulle ($T \in \mathbb{R}^*$) tel que, $\forall x$ on a $f(x + T) = f(x)$

Avec :

- T est appelée période de la fonction $f(x)$
- nT ($n \in \mathbb{Z}^*$) sont aussi des périodes de la $f(x)$
- La plus petite période > 0 s'appelle : période fondamentale (P.F) de la $f(x)$

Exemples :

- Les fonctions trigonométriques : $\cos(\frac{2\pi}{T}x)$, $\sin(\frac{2\pi}{T}x)$
- Exponentielles périodiques : $e^{i\alpha x}$ avec $\alpha \in \mathbb{R}^*$

On cherche la période fondamentale de la fonction exponentielle périodique,

$$\text{on a : } e^{i\alpha(x+T)} = e^{i\alpha x} \Rightarrow e^{i\alpha T} = 1 = e^{i2n\pi} \Rightarrow T = \frac{2n\pi}{\alpha}$$

La P.F est $T = \frac{2\pi}{\alpha}$ ($n=1$) de la fonction $e^{\frac{i2\pi x}{T}} = \cos(\frac{2\pi}{T}x) + i \sin(\frac{2\pi}{T}x)$

1.1.2 Développement en série de Fourier

1.1.2.1 Définition

Soit $f(x)$, une fonction périodique de la période T . Elle peut être exprimée sous la forme :

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} c_n e^{ik_n x} \quad \text{avec} \quad k_n = \frac{2\pi n}{T}$$

Les coefficients C_n sont donnés par : $C_n = \frac{1}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} f(x) e^{-ik_n x} dx$ où $x_0 \in \mathbb{R}^*$

Exemple d'application :

Développer en série de Fourier la fonction périodique ($T = 2\pi$) suivante : $f(x) = 1$ pour $0 \leq x \leq \pi$ et $f(x) = 0$ pour $\pi \leq x \leq 2\pi$

1.1.2.2 Égalité de Bessel-Parseval

$$\frac{1}{T} \int_{x_0}^{x_0+T} |f(x)|^2 dx = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} |C_n|^2$$

1.2 Transformation de Fourier

1.2.1 Définition :

Soit $f(x)$ une fonction quelconque et soit $f_T(x)$ une fonction périodique de la période fondamentale T , qui coïncide avec $f(x)$ sur l'intervalle $[-\frac{T}{2}, \frac{T}{2}]$; $f_T(x)$ peut être développée en série de Fourier:

$$f_T(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} c_n e^{ik_n x} \quad \text{avec} \quad k_n = \frac{2\pi n}{T} \quad \text{et} \quad c_n = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx$$

$$f_T(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \frac{1}{T} \left[\int_{-\frac{T}{2}}^{+\frac{T}{2}} f(\mu) e^{-ik_n \mu} d\mu \right] e^{ik_n x}$$

Or $k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{T}$ donc $\frac{1}{T} = \frac{k_{n+1} - k_n}{2\pi}$

Quand T tend vers l'infinie, $k_{n+1} - k_n$ tend vers dk et $f_T(x)$ tend vers $f(x)$ et \sum tend vers \int

D'où $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f}(k) e^{ikx} dk$ avec $\bar{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$

$f(x)$ et $\bar{f}(x)$ sont dites **transformées de Fourier (T.F.)**.

En mécanique quantique, du fait que: $p = \hbar k$ ($dk = \frac{dp}{\hbar}$), on utilise ces relations sous la forme suivante:

En posant : $f(x) = \psi(x)$ et $\bar{f}\left(\frac{p}{\hbar}\right) = \sqrt{\hbar}\bar{\psi}(p)$

On a ces deux fonctions :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{ip\frac{x}{\hbar}} dp \quad \text{et} \quad \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{ip\frac{x}{\hbar}} dx$$

$\psi(x)$ est une fonction d'onde et $\bar{\psi}(p)$ sa transformée de Fourier.

Notation :

$$\psi(x) = \bar{F}[\bar{\psi}(p)]$$

$$\bar{\psi}(p) = \bar{F}[\psi(x)]$$

1.2.2 Propriétés

$$\checkmark \quad \bar{\psi}(p - p_0) = F[e^{\frac{ixp_0}{\hbar}} \psi(x)]$$

$$\checkmark \quad e^{\frac{ix_0 p}{\hbar}} \bar{\psi}(p) = F[\psi(x - x_0)]$$

$$\checkmark \quad F[\psi(cx)] = \frac{1}{|c|} \bar{\psi}\left(\frac{p}{c}\right)$$

En particulier $F[\psi(-x)] = \bar{\psi}(-p)$ (il y a conservation de la parité)

Si $f^{(n)}$ désigne la dérivée n^{ième} de la fonction f , des dérivations successives sous le signe somme donne : $F[\psi^{(n)}(x)] = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \bar{\psi}(p)$ et $\bar{\psi}^{(n)}(p) = F\left[\left(-\frac{ix}{\hbar}\right)^n \psi(x)\right]$

Lorsque $\psi(x)$ a l'allure d'un pic de largeur Δx , la largeur Δp de $\bar{\psi}(p)$ vérifie la relation : $\Delta x \Delta p \geq \hbar$ ou $(\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2})$ selon la méthode de calcul de la largeur.

1.2.3 Formule de Parseval-Plancherel

La transformée de Fourier conserve la norme :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p)|^2 dp$$

Exemples

Nous nous contentons de donner deux exemples de transformées de Fourier, pour lesquels les calculs ne présentent pas de difficultés :

✓ Fonction créneau: $\psi(x) = \frac{1}{a}$ pour $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$ et $\psi(x) = 0$ ailleurs. On obtient

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sin(\frac{pa}{2\hbar})}{\frac{p}{2\hbar}}$$

✓ Fonction Gaussienne: $\psi(x) = e^{-\frac{x^2}{a^2}}$ pour $x \in \mathbb{R}$. On obtient $\bar{\psi}(p) =$

$$\frac{a}{\sqrt{2\hbar}} e^{-\frac{p^2 a^2}{4\hbar^2}}$$

Notons que la forme gaussienne est conservée dans la transformation de Fourier.

1.2.4 Transformation de Fourier dans l'espace à 3 D

Pour des fonctions d'ondes dépendant de 3 variables on a :

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} d^3p$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar}} d^3r$$

Les propriétés énoncées plus haut se généralisent aisément à 3 D

1.3 Fonction δ de Dirac

La fonction δ est en réalité une distribution. Nous allons la considérer ici du point de vue de la physique et la traiter comme une fonction ordinaire ; cette approche, bien que non rigoureuse mathématiquement, est suffisante pour les applications à la mécanique quantique.

1.3.1 Définition

On considère la fonction δ définie par : $\delta^{(\varepsilon)}(x) = \frac{1}{\varepsilon}$ pour $-\frac{\varepsilon}{2} \leq x \leq \frac{\varepsilon}{2}$ et $\delta^{(\varepsilon)}(x) = 0$ pour $|x| > \frac{\varepsilon}{2}$

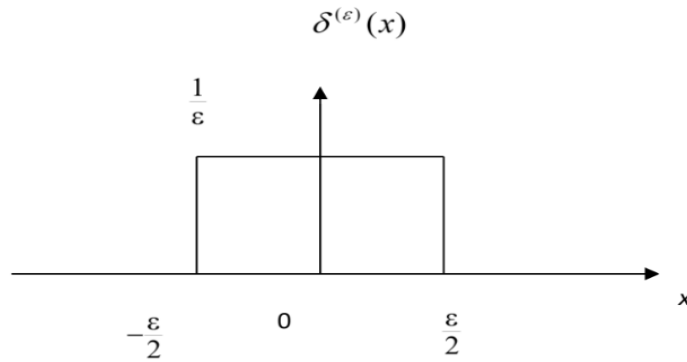


Figure 1-1: fonction créneau de largeur ε , de hauteur $\frac{1}{\varepsilon}$, centré en $x = 0$

Soit $f(x)$ une fonction quelconque définie en $x = 0$, Calculons l'intégrale :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta^{(\varepsilon)}(x) dx$$

Si ε est suffisamment petit $f(x) \approx f(0)$ sur l'intervalle $[-\frac{\varepsilon}{2}, \frac{\varepsilon}{2}]$.

$$\text{L'intégrale s'écrit } \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta^{(\varepsilon)}(x) dx \approx f(0) \int_{-\frac{\varepsilon}{2}}^{+\frac{\varepsilon}{2}} \frac{1}{\varepsilon} dx = f(0)$$

L'approximation est d'autant meilleure que ε est plus petit.

Nous passons donc à la limite $\varepsilon = 0$ et définissons la fonction δ par la relation:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0) \text{ qui est valable pour toute fonction } f(x) \text{ définie à l'origine.}$$

D'une façon plus générale, la fonction de Dirac $\delta(x - x_0)$, centrée sur x_0 , est définie par:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0) \text{ avec } \delta(x - x_0) = \infty \text{ si } x = x_0 \text{ et } 0 \text{ ailleurs}$$

1.3.2 Fonctions tendent vers δ

Les fonctions suivantes tendent vers la fonction δ

$$\frac{1}{\varepsilon} e^{-\frac{|x|}{\varepsilon}} ;$$

$$\frac{1}{\varepsilon \sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon^2}} ;$$

$$\frac{1}{\pi} \frac{\sin(\frac{x}{\varepsilon})}{x}$$

1.3.3 Propriétés de δ

Les propriétés que nous allons énoncer se démontrent facilement à partir de la définition précédente : On multiplie les deux membres des égalités ci-dessous par une fonction $f(x)$, on intègre, et on montre que les résultats obtenus sont bien égaux.

$$\checkmark \quad \delta(-x) = \delta(x)$$

- ✓ $\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$
- ✓ $g(x)\delta(x - x_0) = g(x_0)\delta(x - x_0)$
- ✓ $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y)\delta(x - z)dx = \delta(y - z)$

1.3.4 Transformée de Fourier de δ

- ✓ $F[\delta(x - x_0)] = \bar{\delta}x_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) e^{-ip\frac{x}{\hbar}} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip\frac{x_0}{\hbar}}$

En particulier

- ✓ $\bar{\delta}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} = F[\delta(x)]$

La transformée de Fourier inverse est :

- ✓ $F[\bar{\delta}x_0(p)] = \delta(x - x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\delta}x_0(p) e^{ip\frac{x}{\hbar}} dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x_0)\frac{p}{\hbar}} dp$

En particulier

- ✓ $\bar{F}[\bar{\delta}_0(p)] = \delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ix\frac{p}{\hbar}} dp$

1.3.5 Dérivée de δ

On définit la dérivée de $\delta'(x)$ de la fonction $\delta(x)$ par l'égalité :

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

Ce résultat est obtenu après avoir fait une intégration par partie.

On peut définir de la même façon $\delta^{(n)}(x)$ par :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(x)f(x)dx = (-1)^n f^{(n)}(0)$$

1.3.6 La fonction δ dans l'espace à 3 D

La fonction de Dirac $\delta(\vec{r})$ à 3 D sera définie comme suit:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\vec{r})f(\vec{r})d^3r = f(\vec{0})$$

Et plus généralement $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)f(\vec{r})d^3r = f(\vec{r}_0)$

On peut décomposer $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ en un produit de 3 fonctions à une dimension:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0)$$

Chapitre 2 Introduction à la mécanique quantique

2.1 Historique de la mécanique quantique

Jusqu'aux environs de 1870, deux disciplines dominaient le monde de la physique :

- ✓ La mécanique classique expliquait tous les phénomènes relatifs à la matière, dont on ne connaissait que l'aspect corpusculaire.
- ✓ L'électromagnétisme de Maxwell expliquait tous les phénomènes relatifs au rayonnement, dont on ne connaissait que l'aspect ondulatoire.

L'interaction entre matière et rayonnement s'expliquait bien par la force de Lorentz :

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$$

Vers la fin du 19^{ième} siècle, certains phénomènes nouveaux n'ont pas pu être expliqués dans le cadre de la physique classique, et notamment : le rayonnement du corps noir ; l'effet photoélectrique ; l'effet Compton et le spectre des atomes.

D'où l'apparition de deux nouvelles théories qui remettent en question la théorie classique en différents points :

- ✓ 1905 : la relativité d'Einstein (v proche de c).
- ✓ 1900-1927 : la Mécanique Quantique (échelle atomique).

Néanmoins, la théorie classique reste une bonne approximation de ces deux théories dans le cas où la vitesse $v \ll c$, ou bien dans le cas où l'échelle serait macroscopique.

2.2 Aspect corpusculaire du rayonnement

2.2.1 Rayonnement du corps noir

2.2.1.1 Définition

Dans les années 1900, des expériences avaient montré que lorsqu'on chauffait un solide, ce corps émettait des radiations. A mesure que la température s'élève, la fréquence de la radiation augmente et l'on passe d'une radiation rouge à une radiation jaune puis blanche. A une température donnée, l'intensité de la radiation dépend de la fréquence ; elle croît, passe par un optimum puis décroît. Cela était contradictoire avec la théorie des ondes électromagnétiques selon laquelle l'intensité ne dépend que de l'amplitude de la radiation et ne dépend pas de sa fréquence. Par définition, un corps noir est un corps absorbe intégralement les radiations qu'il reçoit.

2.2.1.2 Expérience :

Chacun a pu observer l'émission optique d'un corps porté à haute température : un four ou une lampe à incandescence par exemple : à 600°C , il est rouge sombre, à 1200°C , sa couleur devient plus claire et plus vive, à 2500°C , il émet une lumière blanche intense.

L'analyse spectrale de la lumière émise révèle un spectre continu où toutes les fréquences ν sont représentées.

Le profil de la densité d'énergie lumineuse est représenté sur la figure 1 : ($Ud\nu$ est la quantité d'énergie émise par unité de volume, par les fréquences situées entre ν et $\nu + d\nu$).

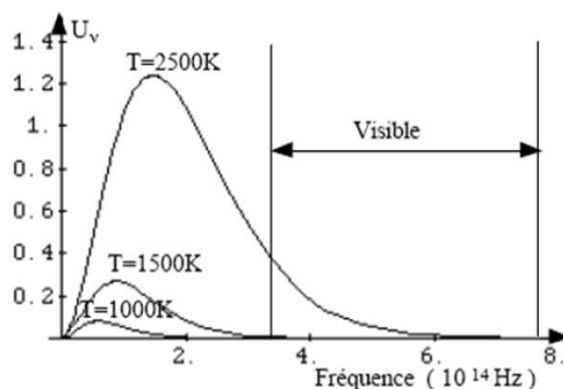


Figure 2-1 : Spectre d'émission d'un corps porté à haute température (corps noir).

2.2.1.3 Interprétation classique :

L'absorption de la chaleur provoque des vibrations de liaisons. La fréquence de vibration est une caractéristique des liaisons ou des groupes de liaisons qui se mettent à vibrer. L'intensité dépend du nombre de liaisons semblables. On peut montrer que ce nombre croît avec la fréquence. Prenons un segment de longueur L . Il y a un mode de vibration si $\lambda = L$. Si l'on divise notre segment en n segments plus petits, chacun peut vibrer avec la longueur d'onde $\lambda = \frac{L}{n}$ et il y a n modes de vibration. En tenant compte cela, l'intensité des radiations devrait croître avec la fréquence selon une loi en n^2 ou n^3 selon que l'on considère la surface ou le solide en trois dimensions. Le résultat inexplicable est « la décroissance à haute fréquence ».

Selon la théorie classique, il y a émission d'une radiation lorsque le solide, après avoir absorbé de l'énergie thermique, repère cette énergie en retombant à l'état de plus basse énergie. Le solide est dans un état excité, il retombe dans l'état fondamental (l'état de plus basse énergie) en émettant une radiation.

L'énergie de la radiation est la différence de l'énergie des deux états. Quand la température est élevée, le **niveau excité moyen** est haut et donc l'émission doit devenir plus intense. Ce niveau est $E^* - E = k_B T$, où k_B est la constante de Boltzmann.

En représentant le rayonnement comme une onde placée dans le cadre d'un aspect ondulatoire, Rayleigh et Jeans ont montré que :

$$U_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T$$

Où $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ est la constante de Boltzmann et $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ est la vitesse de la lumière.

La théorie de Rayleigh et Jeans comme le montre la figure précédente, n'expliquait que le début de la courbe, elle n'expliquait pas le maximum, ni la décroissance exponentielle aux fréquences élevées. De plus, la densité totale de l'énergie émise est infinie :

$$u(T) = \int_0^\infty U_\nu(T) d\nu = \infty \quad (\text{Catastrophe de l'UV}).$$

Ce qui est en contraire à la nature où tout est fini quel que soit sa grandeur.

2.2.1.4 Hypothèse de Planck (1900) :

En 1900, Planck a résolu cette contradiction en supposant qu'un état excité ne pouvait pas avoir n'importe quelle énergie, mais que cette énergie devait avoir des valeurs déterminées en fonction de la fréquence émise :

✓ La surface du corps noir est formée d'atomes et que chaque atome est un petit oscillateur de fréquence ν tel que l'énergie de l'atome oscillant s'exprime sous la forme : $E_n = nh\nu$ où n est un entier et h est la constante de Planck : $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$ J.s.

✓ La matière et le rayonnement de fréquence ν ne peuvent échanger que des quantités d'énergie égales à $h\nu$ ou à un de ses multiples. $h\nu$ est appelé 'quantum' d'énergie.

L'hypothèse de Planck, associée aux méthodes de la thermodynamique statistique, conduit à la formule dite de Planck :

$$U_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

$$\text{Si } \nu \rightarrow 0; e^{\frac{h\nu}{k_B T}} \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T} \text{ et par conséquent } U_\nu(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T$$

On retrouve le modèle de Rayleigh et Jeans.

La densité totale d'énergie émise à une température T est :

$$u(T) = \int U_\nu(T) d\nu = \frac{8}{15} \frac{\pi^5 k_B^4}{c^3 h^3} T^4 = \alpha T^4 \quad (\alpha = 7,56 \cdot 10^{-16} \text{ JK}^{-4}\text{m}^{-3})$$

Cette loi est connue sous le nom de la loi de Stefan et elle est bien vérifiée expérimentalement. Si λ_m est la longueur d'onde correspondant au maximum de la densité d'énergie à la température T ; on obtient : $\lambda_m T = cte$. Cette relation est connue sous le nom de : loi de Wien.

2.2.1.5 Conclusion :

On a pu expliquer les lois principales du rayonnement du corps noir en supposant que l'échange d'énergie entre la matière et le rayonnement s'opère, non plus continûment comme dans la théorie classique, mais sous forme discontinue.

Remarque :

La dimension de h est l'action (énergie \times temps). Toute quantité physique de dimension égale à l'action doit être comparée à h pour voir si elle relève du domaine quantique ou classique.

2.2.2 Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique est découvert par Hertz en 1887, et il ne trouvait pas d'explication dans le cadre des théories classiques. L'effet photoélectrique se conçoit comme l'interaction d'un photon avec un atome. Ce dernier absorbe l'énergie du photon et passe dans un état excité. Il revient à son état fondamental en éjectant un électron de ses couches orbitales ce qui conduit à son ionisation.

2.2.2.1 Expérience

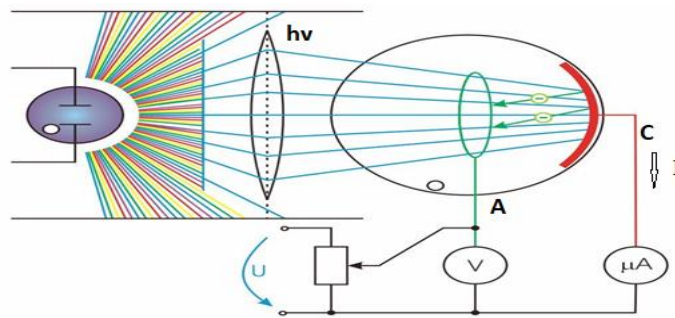


Figure 2-2 : dispositif expérimental

La cathode portée à un potentiel V_C reçoit un rayonnement excitateur de fréquence ν et de puissance P . L'anode portée à un potentiel V_A recueille les électrons émis par la cathode, L'expérience consiste à mesurer l'intensité du courant qui traverse la cellule photoélectrique en fonction des trois paramètres expérimentaux :

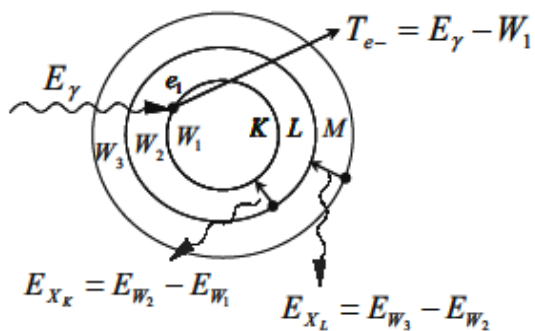
- ✓ La puissance P du rayonnement incident, c'est à dire la quantité d'énergie apportée par la lumière à la cathode par unité de temps
- ✓ La fréquence ν du rayonnement incident, à laquelle correspond la longueur d'onde
- ✓ $V = V_A - V_C$: la différence de potentielle entre l'anode et la cathode.

2.2.2.2 Interprétation quantique :

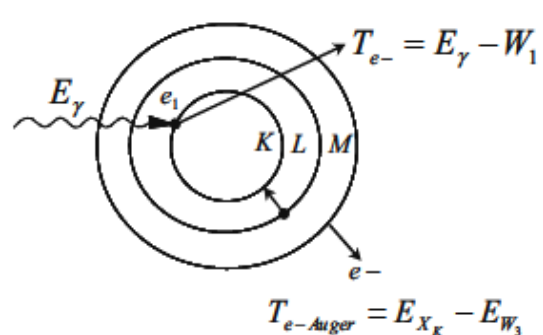
La théorie correcte de l'effet photoélectrique a été formulée par Einstein. Il va plus loin que Planck en supposant que non seulement les échanges d'énergie entre lumière et matière se font par « quantum » $h\nu$, mais que la lumière est formée de grains d'énergie $h\nu$ qu'on appelle « photons » ; l'énergie du photon est $h\nu$ et sa vitesse est c .

L'interprétation de l'interaction photoélectrique est généralement ramenée à une collision entre un photon d'énergie $E_\gamma = h\nu$ et un électron orbital d'un atome d'énergie de liaison W_1 entraînant l'absorption du photon et l'éjection de l'électron avec une énergie cinétique $T_{e\text{-éjecté}} = E_\gamma - W_1$. L'électron éjecté, appelé photoélectron, laisse une orbite vacante qui est occupée par un électron provenant d'une couche électronique plus externe c'est-à-dire plus éloignée du noyau donc d'énergie de liaison plus faible. La couche de l'électron éjecté est généralement celle dont l'énergie de liaison est immédiatement inférieure à l'énergie E_γ de photon incident. Le saut de l'électron sur une couche plus interne libère une énergie égale à la différence des énergies de liaison des deux couches énergétiques considérées. Cette énergie libérée est rayonnée sous forme de photons appelés photons de fluorescence ou rayons X caractéristiques de l'atome (Figure A)

En fonction du numéro atomique Z de l'atome cible, les photons de fluorescence peuvent être classés parmi les rayons X pour les numéros atomiques Z élevés ou peuvent être assimilés à des photons lumineux pour les numéros atomiques Z faibles. Dans ce dernier cas, les photons lumineux sont en compétition avec un deuxième phénomène : l'effet Auger. L'énergie cinétique de cet électron sera égale à $E_{X_K} - E_{W_3}$ où le terme E_{X_K} est la différence énergétique entre les couches électroniques 1 et 2 et le terme E_{W_3} est l'énergie de liaison de l'électron de la couche 3 (Figure B).



A : Réarrangement des électrons avec émission de rayons X caractéristiques



B : Réarrangement des électrons avec émission de l'électron Auger d'énergie $T_{e\text{-Auger}}$

Figure 2-3 : schéma de l'effet photoélectrique avec émission de rayonnement X (A) ou d'électron Auger (B).

Remarque :

La probabilité pour que l'effet Auger remplace l'émission de photon de fluorescence est d'autant plus élevée que le numéro atomique Z de l'atome est petit.

2.2.2.3 Conclusion

L'effet photoélectrique montre que la lumière de fréquence ν est formée de grains, les « photons » qui ont une énergie $h\nu$.

2.2.2.4 Application

L'effet photoélectrique a plusieurs applications dans notre vie courante : La mesure des intensités lumineuses en photométrie ; le comptage d'objets opaques passant devant la cellule (visiteurs d'une exposition, par exemple) ; la mise en marche de dispositifs mécaniques (escaliers, portes).

Exercice d'application:

Une cellule photoélectrique possède une photocathode au césium. Elle est éclairée par une radiation monochromatique de longueur d'onde $\lambda = 0.425 \mu\text{m}$. La puissance captée par la photocathode est $P = 1 \text{ W}$. Les mesures donnent alors : $I_s = 2 \text{ mA}$ et $V_a = 1 \text{ Volt}$

Déterminer :

- 1- L'énergie cinétique maximale de sortie des électrons photo émis.*
- 2- Le travail d'extraction W du césium, en déduire ν_s .*
- 3- Le nombre de photons N captés et le nombre d'électrons n émis par seconde par la cathode.*
- 4- En déduire le rendement quantique η , conclure.*

2.2.3 Effet Compton (1923)

L'hypothèse des photons a reçu une confirmation spectaculaire avec la découverte de l'effet Compton.

2.2.3.1 Expérience

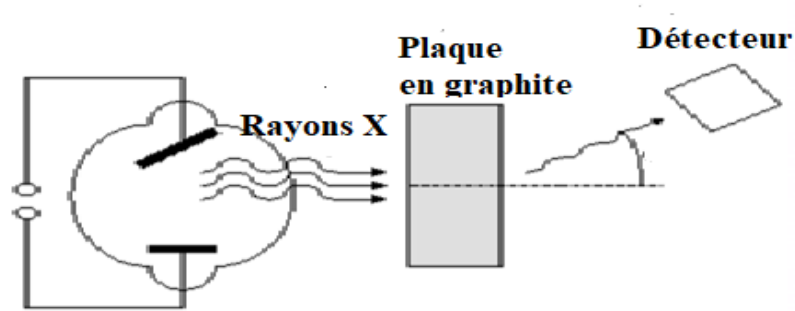


Figure 2-4 : Schéma de la diffusion de rayonnement

Un faisceau de rayons X de longueur d'onde λ , est envoyé sur une substance (contenant un certain nombre d'électrons libres (Calcite, Aluminium)), qui le renvoie dans toutes les directions. On isole une radiation dans la direction θ et on mesure sa longueur d'onde λ' à l'aide d'un interféromètre. On trouve : $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = f(\theta)$.

2.2.3.2 Interprétation théorique

Classique :

La théorie ondulatoire de la lumière prévoit une diffusion identique dans toutes les directions sans variation de la longueur d'onde ; soit $\lambda' = \lambda$, ce qui est en contradiction avec l'expérience.

Quantique :

La diffusion est assimilée à un choc élastique.

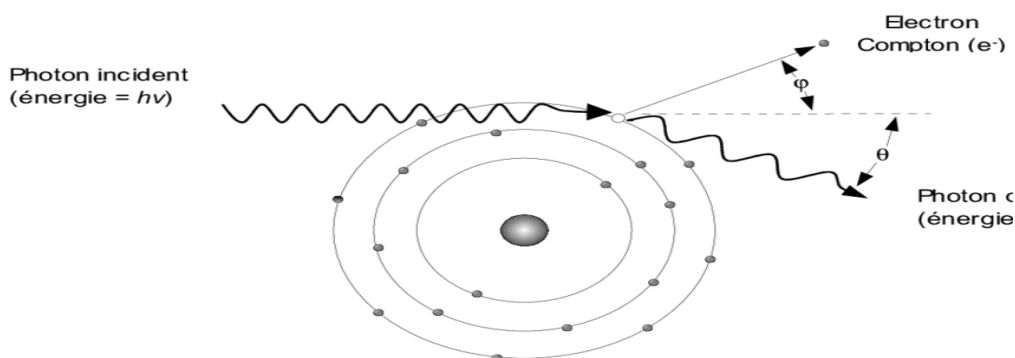


Figure 2-5 : Effet Compton : collision entre un photon et un électron quasi libre

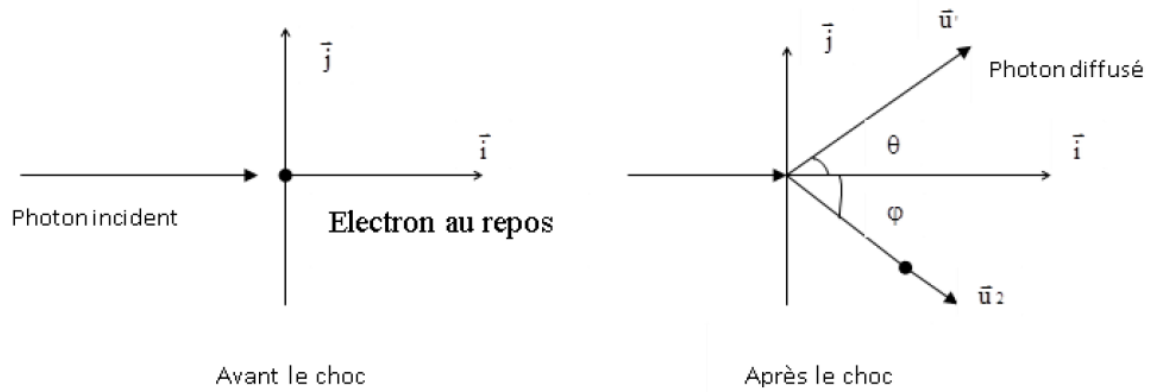


Figure 2-6 : Collision entre un photon et un électron libre

Pour le photon :

$$E = h\nu$$

$$E' = h\nu'$$

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

$$\vec{p}' = \frac{h\nu'}{c} \vec{u}'$$

Pour l'électron :

$$E_1 = m_0 c^2$$

$$E_2 = mc^2 = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = m_0 c^2 + T_2$$

$$\vec{p}_1 = 0$$

$$\vec{p}_2 = p \vec{u}_2$$

Comme il s'agit d'un choc élastique, il y a conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie totale.

La conservation de la quantité de mouvement donne : $\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_2$

La conservation de l'énergie donne : $E + E_1 = E' + E_2$

On obtient la relation suivante : $\nu - \nu' = \frac{h\nu\nu'(1-\cos\theta)}{m_0 c^2}$

Ou, en tenant compte du fait que $\nu = \frac{c}{\lambda}$ et $\nu' = \frac{c}{\lambda'}$

On trouve : $\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos\theta) = f(\theta)$

La variation maximale doit-être observée dans la direction incidente, soit $\theta = \pi$.

Il est facile de vérifier que la quantité $\frac{h}{m_0 c} = 0.02426 \text{ \AA}$ est homogène à une longueur d'onde: c'est la longueur d'onde Compton.

L'ordre de grandeur de cette quantité montre que l'effet ne sera relativement visible que dans le domaine des faibles longueurs d'ondes (de l'ordre de 1 \AA) : c'est pourquoi l'on parle de la diffusion Compton essentiellement pour les rayons X.

Il est remarquable que tous les résultats expérimentaux soient parfaitement interprétés par la dernière formule, justifiant ainsi l'existence d'un caractère corpusculaire du rayonnement.

2.2.3.3 Conclusion :

L'effet Compton vérifie expérimentalement que le photon possède une impulsion : $p = \frac{h\nu}{c}$.

2.3 Aspect ondulatoire du rayonnement

Dans la théorie ondulatoire de la lumière, un rayonnement est caractérisé par une onde. Cette onde se propage et est représentée par une fonction périodique $\psi(r, t)$ où r est une longueur et t le temps.

Les fonctions périodiques sont des fonctions sinus ou cosinus. Grâce aux formules d'Euler, on peut choisir à leur place des exponentielles imaginaires :

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \rightarrow \cos x = \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2}$$

$$e^{-ix} = \cos x - i \sin x \rightarrow \sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$$

$$\psi = A e^{i(kr - \omega t)} = A e^{2\pi i(\frac{r}{\lambda} - \nu t)}$$

A est l'amplitude

L'intensité du faisceau est donné par $\psi^* \psi = A^2$; elle ne dépend ni de k , ni de λ , ni de ν , ni de ω .

λ est la longueur d'onde (homogène à une longueur);

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$ est le nombre d'onde (l'inverse d'une longueur) ν est la fréquence; $\omega = 2\pi\nu$ est la pulsation (inverses d'un temps); $T = \frac{1}{\nu}$ est la période (homogène à un temps).

La fonction ψ est une fonction périodique; $e^{i2\pi} = 1$. Si l'on ajoute 2π à l'exposant (soit par accroissement de r , soit par accroissement de t), l'onde est inchangée.

Deux ondes sont en phase au temps $t=0$

$$\checkmark \quad \text{si } \frac{r_2}{\lambda_2} - \frac{r_1}{\lambda_1} = n$$

$$\checkmark \quad \text{ou si } k_2 r_2 - k_1 r_1 = 2\pi n, \text{ avec } n \text{ entier}$$

Deux ondes sont en phase à l'origine ($r=0$)

$$\checkmark \quad \text{si } \nu_2 t_2 - \nu_1 t_1 = n \text{ (ou } t_2 T_2 - t_1 T_1 = n \text{)}$$

$$\checkmark \quad \text{ou si } \omega_2 t_2 - \omega_1 t_1 = 2\pi n, \text{ avec } n \text{ entier}$$

Au contraire, elles sont en opposition de phase si n est un demi-entier.

Remarque :

Une onde (de période T) est inchangée pour un intervalle de temps égal à la période:

$$t_2 - t_1 = T$$

Pour n quelconque, nous avons un déphasage; Nous avons l'impression visuelle que l'onde ne change pas quand l'exposant reste inchangé, c'est-à-dire quand $\omega\Delta t = k\Delta x$. Pour un accroissement de temps Δt , on obtient un déphasage $\omega\Delta t$, le même que l'on obtiendrait (déphasage de $k\Delta x$) pour un déplacement Δx . On a l'impression que l'onde est inchangée mais qu'elle s'est déplacée avec une vitesse, $V_\varphi = \frac{\omega}{k}$. La vitesse de phase, V_φ , correspond à la conservation visuelle de l'onde. C'est la vitesse du front de l'onde, elle n'est pas forcément associée à un déplacement de matière. Lorsqu'une onde se déplace sur l'eau, les gouttes d'eau ne se déplacent pas mais bougent verticalement. Conserver la vision de l'onde, cela revient à garder l'exposant fixe : $(kr - \omega t) = \text{cte}$

En effet si l'exposant est inchangé, nous aurons l'impression de retrouver la même fonction pour les nouvelles valeurs (r_2 et t_2) que pour les valeurs (r_1 et t_1). $(kr_2 - \omega t_2) = (kr_1 - \omega t_1) \rightarrow k(r_2 - r_1) = \omega(t_2 - t_1)$ d'où $V_\varphi = \frac{r_2 - r_1}{t_2 - t_1} = \frac{\omega}{k} = \lambda \nu$ et $\nu = \frac{V_\varphi}{\lambda}$.

Dans le cas du photon $V_\varphi = c = \lambda \nu$ et $\nu = \frac{c}{\lambda}$

Si l'on admet comme un simple changement de variable $p = \frac{h}{\lambda}$ et $E = h\nu$ et si l'on introduit la notation $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ on peut pour l'instant compléter notre écriture de Ψ sous la forme $\Psi = A e^{i(kr - \omega t)} = A e^{2\pi i(\frac{r}{\lambda} - \nu t)} = A e^{\frac{i}{\hbar}(pr - Et)}$ où h est pour l'instant est une constante.

Nous donnerons plus tard une signification à ces deux termes. h aura alors une dimension et p et E représenteront des grandeurs physiques: l'impulsion et l'énergie.

On a les relations $p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$; $E = \hbar \omega = h\nu = \frac{h}{T}$ et $V_\varphi = \frac{E}{p}$

Si l'on admet $E = \frac{1}{2}mv^2$ et $p = mv$, ce qui définit une nouvelle variable (homogène à une vitesse) $v = \frac{2E}{p}$ on trouve $v = 2V_\varphi$: la grandeur v n'est pas égale à V_φ .

(Pour plus de détails, voir l'optique ondulatoire)

2.4 La quantification de la structure électronique de l'atome

2.4.1 Modèle classique (Rutherford 1911)

Il considère l'atome d'hydrogène comme un noyau autour duquel gravite un électron suivant une trajectoire circulaire.

(Le système = ($e^- + e^+$)). Le noyau est au repos, l'électron de vitesse \vec{v} et de masse m_e est soumis à une force électrique :

$$\vec{F} = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^2} e^2 \vec{e}_r.$$

\vec{F} dérive de l'énergie potentielle U . L'énergie totale du système est donc :

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 + U$$

On montre que E s'écrit: $E = - \frac{1}{8\pi\epsilon_0 r} e^2$

($E < 0$, car l'électron est lié au noyau et il faut lui fournir de l'énergie pour le rendre libre (ionisation)).

Quand l'électron tourne, il rayonne, donc E diminue et par conséquent r diminue et l'électron finira par tomber sur le noyau, ce qui rend l'atome d'hydrogène instable. Or, d'après l'expérience, l'atome d'hydrogène est un système très stable et ne peut être détruit que par l'ionisation (séparation de l'électron et du noyau), ce qui est au contraire d'une chute de l'électron. Ce modèle classique est donc non valable pour expliquer ces phénomènes atomiques.

2.4.2 Modèle semi quantique ou le modèle de Bohr

Au début du XXe siècle, un modèle qui, enfin, commençait à répondre à certaines questions soulevées par la structure et les spectres atomiques a été avancé. En 1913, Niels Bohr a proposé un modèle de structure atomique en prenant comme exemple le modèle de l'hydrogène. Son modèle décrivait non seulement la structure de l'atome, mais il expliquait aussi les spectres atomiques et, de surcroît, prédisait correctement l'existence d'un plus grand nombre de raies atomiques. Le modèle de Bohr semblait être tout ce que les physiciens recherchaient. Pourtant, il y avait un problème, le modèle de Bohr dépassait le cadre de la physique classique et s'aventurait dans le nouveau monde de la physique quantique. Par conséquent, de nombreux hommes de science demeuraient sceptiques. Néanmoins, le modèle de Bohr était de loin supérieur à tout modèle antérieur et il a été accepté à titre de modèle semi-classique de l'atome. Examinons maintenant le modèle de Bohr.

2.4.3 Postulats de Bohr

Bohr est parti d'un modèle planétaire de l'atome. Cependant, pour contourner les problèmes qu'avait rencontrés Rutherford, il a émis plusieurs postulats :

Postulat 1

Les électrons tournent en orbite autour du noyau. Ils sont maintenus en orbite par une force électrostatique.

Le moment cinétique de l'électron est quantifié tel que :

$$L = m_e v r_n = n \hbar$$

où n est un entier. Il y a donc existence de trajectoires privilégiées pour $n = 1, 2, \dots$ (appelées orbites) et comme $E_n = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} e^2 r_n$, il y a donc quantification de l'énergie, le spectre d'énergie est E_1, E_2, \dots

Postulat 2

Les électrons ne peuvent se trouver que sur certaines orbites permises et un électron n'émet pas de rayonnement lorsqu'il est sur l'une de ces orbites. Sur ces orbites permises, l'énergie de l'électron est constante. Ces orbites sont appelées états stationnaires, puisque l'énergie de l'électron est constante. Autrement dit, l'énergie de l'électron est quantifiée – elle ne peut prendre que certaines valeurs. Par conséquent, les orbites permises peuvent être appelées « états énergétiques ».

Dans sa trajectoire, l'électron ne peut ni émettre, ni absorber une radiation. Il ne peut le faire que s'il passe d'une trajectoire à une autre. En utilisant le premier postulat, on montre que:

$$E_n = -\frac{R_z}{n^2} \quad \text{avec} \quad R_z = \frac{e^4 m_e}{8h^2 \epsilon_0^2} = 2,176 \cdot 10^{-18} \text{J} = 13,6 \text{ eV}$$

D'où

$$h\nu_{n,p} = R_z \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right) \Rightarrow \nu_{n,p} = \frac{R_z}{h} \left(\frac{1}{p^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

Cette relation vérifie bien l'expérience, notamment les expériences de Balmer (1885), la lumière émise par un tube rempli d'hydrogène gazeux et soumis à une décharge électrique, constitue un spectre de raies, les fréquences observées correspondantes sont bien représentées par la formule ci-dessus ($p = 2$ et $n > 2$).

En résumé, l'émission de l'énergie par l'électron s'accompagne de la production d'une raie de fréquence $\nu_{n,p}$ telle que : $\nu_{n,p} = E_n - E_p$

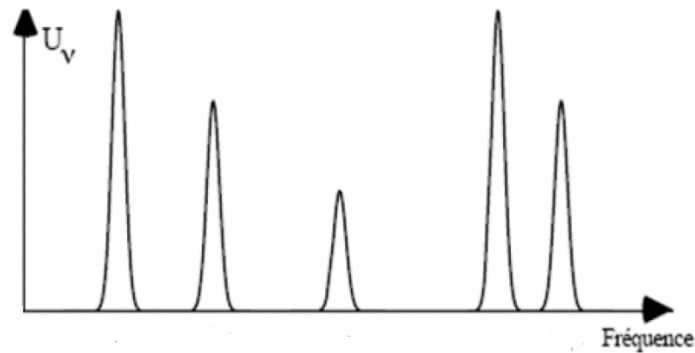


Figure 2-7 : Spectre typique d'émission de raies d'une lampe à décharge

Le rayonnement n'est émis que sur certaines fréquences particulières caractéristiques de l'élément. Ceci est une autre preuve de la discontinuité de l'énergie du fait que l'électron ne peut avoir que certaines énergies discrètes.

Postulat 3

Un électron n'émet un rayonnement que s'il « tombe » d'un état énergétique élevé à un état plus faible. La variation de l'énergie de l'électron (lors du passage de l'état élevé à l'état plus faible) est égale à l'énergie du photon émis. De la même façon, un électron n'absorbe un rayonnement que s'il « saute » jusqu'à un niveau énergétique plus élevé. Maintenant, la variation de l'énergie de l'électron est égale à l'énergie du photon absorbé.

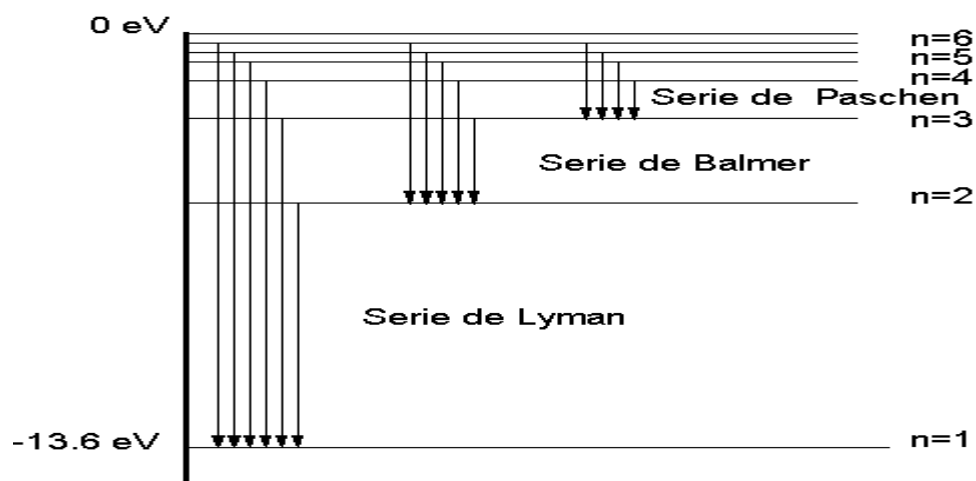


Figure 2-8 : Niveaux d'énergie d'un atome et les transitions spectrales vers le niveau fondamental

Les transitions spectrales peuvent être :

- ✓ Soit émission du quantum : $h\nu_{n,p} = E_n - E_p$ si $E_n > E_p$
- ✓ Soit absorption d'un quantum : $h\nu_{p,n} = E_p - E_n$ si $E_n < E_p$

Postulat 4

Les rayons des orbites permises sont également quantifiés – chaque état énergétique correspond à un rayon particulier. Selon De Broglie et pour que l'onde associée à l'électron soit en mouvement circulaire et ne conduise pas à une interférence destructive, il faut que la circonférence de l'orbite de l'électron soit un multiple entier de la longueur d'onde. On obtient alors un état stationnaire. Cette condition est remplie par une série de rayon r_n où $n=1,2, 3,\dots$ est le numéro de l'orbite appelé nombre quantique principal. La longueur d'onde de l'électron $\lambda_n = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv_n}$ dépend de la vitesse de l'électron sur son orbite.

Remplaçons dans la condition pour un état stationnaire :

$$n\lambda_n = 2\pi r_n \text{ (périmètre de l'orbite } n\text{)}$$

$$n \frac{h}{mv_n} = 2\pi r_n$$

$$n\hbar = mv_n r_n$$

$$r_n = \frac{n\hbar}{mv_n} \text{ (le rayon orbitale)}$$

Remarque :

Noter que le rayon, la vitesse, la longueur d'onde associée à l'électron et l'énergie de l'électron sur l'orbitale augmente avec le nombre quantique n .

Chapitre 3 Aspect ondulatoire de la matière et fonction d'onde

3.1 Hypothèse de De Broglie

Le caractère ondulatoire pouvait être associé à des particules matérielles en plus de leur caractère corpusculaire. Ainsi à un électron d'impulsion \vec{p} , De Broglie a associé une onde (k, ν) où ν est la fréquence ($\nu = \frac{\omega}{2\pi}$); $\vec{k} = k\vec{u}$ est le vecteur d'onde, \vec{u} est un vecteur unitaire porté par la direction de propagation de l'onde. Ensuite, il lui (l'électron) a appliqué les mêmes relations que celles du photon à savoir: $E = \hbar\omega$ ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$) e $\vec{p} = \hbar\vec{k}$.

Donc à chaque particule, on associe une onde de longueur d'onde définie par :

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (\text{pour une particule non relativiste}).$$

3.2 Confirmation expérimentale de l'hypothèse de De Broglie

Pour cela, Davisson et Germer ont utilisé la diffraction d'un faisceau d'électrons par un réseau cristallin constitué d'un empilement régulier d'atomes situés à une distance $d \approx \text{\AA}$ l'un de l'autre.

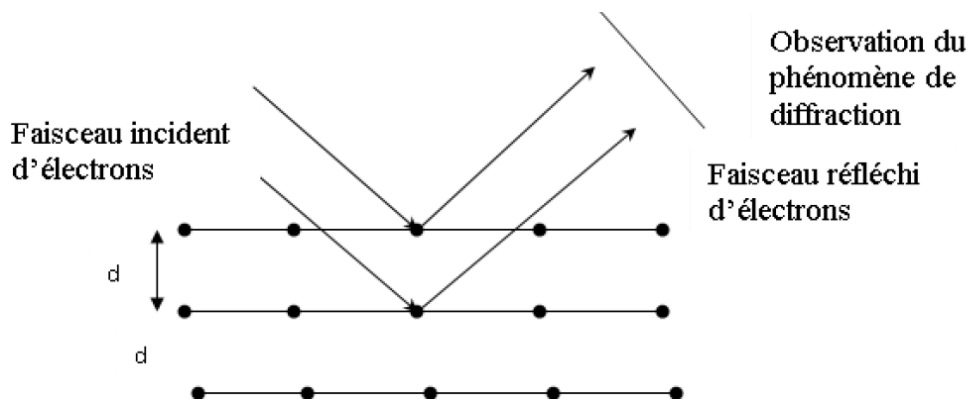


Figure 3-1 : diffraction d'une onde sur les plans réticulaires d'un cristal

L'observation des figures de diffractions (les mêmes que celles fournit par la lumière) au niveau du faisceau réfléchi confirme donc la nature ondulatoire de l'électron.

Supposons que ces électrons sont accélérés par une tension V , on a :

$$eV = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow p = \sqrt{2meV}$$

La longueur d'onde associée à ces électrons est : $\lambda_{th} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}$, on peut la reformuler et de la retrouver en ainsi Å : $\lambda_{th} = \frac{12,3}{\sqrt{V}} \text{Å}$

Cette valeur théorique doit être comparée aux valeurs expérimentales obtenue à partir des « anneaux de diffractions » : $\lambda_{exp} = 2d \sin \theta$ (relation de Bragg).

Pour des tensions variant entre 104 et 2104 volts, correspondant à des longueurs d'ondes de 0.1 Å à 0.07 Å, la vérification s'effectue à 10^{-3} près.

3.3 La fonction d'onde

En physique classique, une particule est décrite par sa position $r(t)$. L'évolution de sa position (la trajectoire de la particule) est donnée par l'équation de Newton $m \frac{d^2r}{dt^2} = F(r, t)$. En physique quantique, en vertu de la dualité onde-corpuscule, la particule est maintenant décrite par une fonction d'onde $\psi(r, t)$ dont nous décrirons la signification et l'équation qui donne son évolution (l'équation de Schrödinger).

3.4 Interprétation de la fonction d'onde

Nous associons maintenant à une particule une quantité ψ que nous appelons fonction d'onde. ψ est un champ scalaire dépendant du temps : $\psi = \psi(r, t)$. Cette notion de fonction d'onde est à rapprocher des observations expérimentales qui nous ont montré la dualité onde-corpuscule. Comme pour les phénomènes ondulatoires, $\psi(r, t)$ est en général une fonction complexe. $\psi(r, t) \in \mathbb{C}$

Que représente ψ ? Nous donnons ici l'interprétation de Born. Cette interprétation relie la quantité $|\psi(r)|^2 = \psi(r) \psi^*(r)$, (où $|\psi(r)|^2 =$ Densité de probabilité et $\psi^*(r) =$ conjugué complexe de $\psi(r)$) à la notion de densité de probabilité de trouver la particule en r . La probabilité de trouver la particule dans un volume $dV = d^3r$ autour de r est $|\psi(r)|^2 d^3r$ avec cette interprétation, ψ est l'amplitude de probabilité et elle peut être positive, négative, ou complexe, car seule $\psi \psi^* = |\psi|^2$ doit être positive.

Plus généralement, nous associons à la particule une fonction d'onde $\psi(r, t)$ complexe. La connaissance de cette fonction permet alors de connaître l'évolution dynamique de la probabilité de trouver la particule dans un volume $dV = d^3r$ autour de tout point r en fonction du temps.

3.4.1 Fonction d'onde associée à une particule

En mécanique classique MC,

La description d'un système à un instant donné est entièrement définie par la donnée de six paramètres : les trois composantes de la position $r(t)$ du centre de masse et les trois composantes de la vitesse $v(t)$. Toutes les variables dynamiques (énergie, quantité de mouvement, moment cinétique, etc....) se trouvent ainsi déterminés.

En mécanique quantique MQ,

La description d'un système est plus compliquée, son état dynamique à un instant donné est caractérisé par la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ (d'après De Broglie). Cet état dépend d'une infinité de paramètres qui sont les valeurs prises par $\psi(\vec{r}, t)$ en tous les points r de l'espace. En général, dans un état dynamique donné, la particule est mal localisée car la position \vec{r} est mal déterminée.

Ceci, nous incite à remplacer la notion de trajectoire d'une particule (MC) par la notion de probabilité de présence $dP(r, t) = |\psi(r)|^2 d^3r$ de trouver la particule à un instant donné dans un élément de volume d^3r entourant le point r (MQ).

Il est bien évident que : $\iiint dP(r, t) = \iiint |\psi(r)|^2 d^3r = 1 \Rightarrow \psi(\vec{r}, t)$ doit être de carré sommable ($\iiint |\psi(r)|^2 d^3r$ est finie dans l'espace) et normalisée de façon à satisfaire à l'équation précédente. Donc $\psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence et elle contient toutes les informations qu'il est possible d'avoir sur une particule.

3.4.2 Onde plane

Une onde plane est une onde de la forme : $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$ où ψ_0 est l'amplitude ; $\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$ est la pulsation ; $\vec{k} = 2\pi\lambda\vec{u}$ est le vecteur d'onde.

La quantité $\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}$ est la phase de l'onde au point M($\overrightarrow{OM} = \vec{r}$) et à l'instant t, $\vec{k} \cdot \vec{r}$ constitue le déphasage de l'onde entre le point M et l'origine au même instant.

La représentation de l'onde de De Broglie par une telle onde n'est pas valable du fait qu'elle n'est pas de carré sommable. En effet : $\iiint |\psi(r)|^2 d^3r = |\psi_0|^2 \iiint d^3r = \infty$

3.4.3 Paquet d'ondes

Un paquet d'ondes est une superposition d'ondes planes dont les vecteurs d'ondes \vec{k} sont contenus dans un petit domaine $\Delta\vec{k}$, centré autour d'un vecteur \vec{k}_0 :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi^2} \int f(\vec{k}) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d^3k \quad \text{où } f(\vec{k}) \text{ est le facteur de forme de l'onde.}$$

Une telle onde peut convenir à la représentation de l'onde de De Broglie du fait qu'elle peut-être de carré sommable.

On montre que $\iiint |\psi(r)|^2 d^3r$ est finie. Ce paquet d'ondes représentera en MQ la particule et permettra d'obtenir toutes les informations utiles sur le système physique constitué par cette particule.

3.4.4 Vitesse de phase – Vitesse de groupe

Vitesse de phase : c'est la vitesse de propagation de l'onde. Par définition elle est donnée par : $v_\phi = \frac{\omega}{k}$ avec $\omega = f(k)$ (appelée relation de dispersion)

Vitesse de groupe : c'est la vitesse du centre du paquet d'onde. Elle est définie par : $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

Pour un milieu non dispersif : $v_\phi = cte \forall \omega$ et $v_\phi = v_g$

et pour un milieu dispersif : $v_\phi = f(\omega)$ et $v_\phi \neq v_g$

Exemples :

Cas du photon : $\omega = kc$ et $v_\phi = k = c$

Cas d'une particule libre (énergie purement cinétique) : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ donc : $v_\varphi = \frac{\hbar k}{2m}$ et $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}$. La vitesse de groupe du paquet d'onde est donc égale à la vitesse classique de la particule.

3.4.5 Principe d'incertitude d'Heisenberg

Un résultat classique en mathématique entre les largeurs approximatives de deux fonctions $\psi(x)$ et $\bar{\psi}(p)$, transformées de Fourier l'une de l'autre s'écrit : $\Delta x \Delta p \geq \hbar$

On remarque que si Δx tend vers 0 alors Δp tend vers l'infini et réciproquement si Δp tend vers 0 alors Δx tend vers l'infini. C'est-à-dire, si on cherche à mesurer la position avec une grande précision (incertitude très petite), il serait impossible de définir sa vitesse avec une incertitude définie. Cette impossibilité n'est pas technique mais fondamentale et constitue le principe d'incertitude d'Heisenberg (1927).

La généralisation à 3 dimension s'écrit : $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar, \Delta y \Delta p_y \geq \hbar, \Delta z \Delta p_z \geq \hbar$; une quatrième relation s'écrit : $\Delta E \Delta t \geq \hbar$

Pour bien montrer cette impossibilité de mesurer dans la même expérience les caractères corpusculaires d'une particule (\vec{r} et t) et les caractères ondulatoires ($\lambda = \frac{h}{p}$ et $v = \frac{E}{h}$), prenons l'exemple suivant :

Supposons qu'on cherche à déterminer la position d'un électron à un instant donné. Pour cela, on envoie sur lui un flux de photons. Mais vu la faiblesse de sa masse (électron), ces photons vont modifier sa vitesse, donc il serait impossible de définir exactement sa position et sa vitesse avec une seule mesure.

Si dans le domaine macroscopique, les appareils de mesure d'une grandeur physique n'ont aucune influence sur la mesure, on voit que ce n'est pas le cas dès qu'il s'agit du monde microscopique.

Exemple :

Un corpuscule de masse m oscille entre deux parois, avec une vitesse $v = cte$ ($v = 2.3 \cdot 10^6 \text{ m/s}$). La distance entre les deux parois est $2a$.

Application :

Si $\Delta x = a$, quelle est Δv ? Quelle est ΔE_c ?

Chapitre 4 Équation de Schrödinger

4.1 Introduction :

La question qui se pose est maintenant la suivante : si on poursuit le parallèle avec le mouvement d'une particule, il faut alors trouver une équation pour décrire la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$. Vous pouvez par exemple vous poser la question suivante : soit un atome d'hydrogène formé d'un proton et d'un électron. La fonction d'onde $\psi(\vec{r})$ permet de calculer la densité de probabilité $|\psi|^2$ de trouver l'électron en un point r . Mais comment trouver la fonction d'onde ψ ? Ce fut le mérite du physicien autrichien E. Schrödinger d'avoir posé l'équation qui donne l'évolution de $\psi(\vec{r}, t)$, connue sous le nom d'**équation de Schrödinger**

L'équation de Schrödinger est l'équation de base de la mécanique quantique, elle résulte de l'application de l'équation générale de propagation des ondes planes ($\Delta\psi - \varepsilon\mu \frac{\partial\psi}{\partial t} = 0$) au mouvement de l'onde associée à une particule.

4.2 Conditions imposées

L'équation de Schrödinger doit :

- ✓ Être linéaire et homogène : si ψ_1 et ψ_2 sont solutions, alors toute combinaison linéaire de ψ_1 et ψ_2 est aussi solution.
- ✓ Être une équation différentielle du 1^{er} ordre par rapport au temps. C'est-à-dire que l'évolution ultérieure de $\psi(\vec{r}, t)$ est entièrement définie par la connaissance de (\vec{r}, t_0) .
- ✓ Obéir au principe de correspondance, c'est-à-dire conduire aux équations de la mécanique classique dans la limite $\hbar \rightarrow 0$.

Ces conditions imposées résultent du fait que la fonction d'onde doit définir entièrement l'état dynamique de la particule, à savoir son énergie et son impulsion.

4.3 Établissement de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

Soit une particule libre pour laquelle $E = \frac{p^2}{2m}$ et soit le paquet d'ondes :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{2\pi^{\frac{3}{2}}} \int f(\vec{k}) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d^3k$$

Du fait que $E = \hbar\omega$ et $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

on posera : $F(\vec{p}) = \frac{1}{\hbar^3 2\pi^{\frac{3}{2}}} \int f(\frac{\vec{p}}{\hbar})$

d'où

$$\psi(\vec{r}, t) = \int f(\vec{p}) e^{-\frac{i(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})}{\hbar}} d^3p$$

Si on calcule $\frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$ et $\Delta \psi(\vec{r}, t)$ on trouve :

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

C'est l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour une particule libre (particule qui n'est soumise à aucun champ de forces : toute son énergie est purement cinétique).

Si la particule est soumise à un champ de forces : $\vec{F} = -\text{grad } V(\vec{r}, t)$ où $V(\vec{r}, t)$ est l'énergie potentielle de la particule. Son énergie totale serait :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit dans ce cas :

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

En général, on écrit cette équation sous la forme : $H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$, où H est l'opérateur Hamiltonien défini par : $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t)$

Principe de correspondance :

Comparons l'équation classique : $\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) = E$ et l'équation de Schrödinger :

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

On peut remarquer les correspondances suivantes :

$$E \leftrightarrow \frac{i\hbar\partial}{\partial t} \qquad p^2 \leftrightarrow -\hbar^2\Delta \qquad \vec{p} \leftrightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$$

Règles de formation de l'équation de Schrödinger d'un système quantique :

- ✓ Déterminer la fonction de Hamilton du système en coordonnées cartésiennes
- ✓ Utiliser le principe de correspondance

4.4 Équation de Schrödinger indépendante du temps

C'est le cas où l'énergie potentielle de la particule est indépendante du temps :

$$dV(\vec{r}, t)dt = 0 \Leftrightarrow V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$$

La fonction d'onde doit vérifier dans ce cas l'équation :

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

Cherchons s'il existe des solutions de cette équation de la forme : $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})\chi(t)$

En reportant cette solution dans l'équation ci-dessus, on obtient :

$$\frac{1}{\varphi(\vec{r})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\varphi(\vec{r}) = \frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{d\chi(t)}{dt}$$

Cette équation indique l'égalité entre une fonction de t seul (membre de droite) et une fonction de \vec{r} seul (membre de gauche).

L'égalité n'est possible que si chacune de ces fonctions est en fait une constante qui représente l'énergie totale E de la particule puisque $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$ est l'opérateur Hamiltonien associé à l'énergie totale.

Après la résolution de l'équation : $\frac{i\hbar}{\chi(t)} \frac{d\chi(t)}{dt} = E$, on trouve $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$ avec $\varphi(\vec{r})$ solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps est :

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

Une fonction d'onde de la forme $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$ ou $\varphi(\vec{r})$ est appelée solution stationnaire de l'équation de Schrödinger. Elle conduit à une densité de probabilité indépendante du temps ($|\psi(r, t)|^2 = |\varphi(r)|^2$).

L'équation peut l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrire : $H \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$ où H est l'opérateur Hamiltonien tel que : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(\vec{r})$

L'équation $H \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$ est appelée : équation aux valeurs propres de l'opérateur linéaire H ou équation aux états stationnaires de l'énergie.

En général, cette équation n'admet de solutions que pour certaines valeurs propres E_n de l'énergie qui correspondent aux fonctions propres $\varphi_n(\vec{r})$. Ces fonctions doivent vérifier les propriétés suivantes :

- ✓ Être de carré sommable.
- ✓ Être continues
- ✓ Leurs dérivées doivent être continues si le potentiel est fini.

4.4.1 Équation de Schrödinger à une dimension

Les cas les plus simples sont ceux obtenus à une dimension. L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension s'écrit $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$

4.4.2 Cas où $V(x) = 0$

L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension devient $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$. La solution générale est $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ avec $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, et A et B des constantes. Pour vérifier que $\psi(x)$ est une solution, il suffit de la remplacer dans l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (Ae^{ikx} + Be^{-ikx}).$$

Donnons maintenant l'interprétation de Born de $\psi(x)$.

Cas où $\psi(x) = Ae^{ikx}$ ($B = 0$) :

La densité de probabilité est $|\psi(x)|^2 = \psi(x)\psi^*(x) = |A|^2$. La densité de probabilité est une constante indépendante de la position.

Notez que nous avons ici un problème : la normalisation de $\psi(x)$ demande que $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, mais comme $|\psi(x)|^2$ vaut $|A|^2$, l'intégrale diverge ! Quelle est l'interprétation physique du résultat quantique ?

Nous décrivons la particule de masse m par la fonction d'onde $\psi(x) = Ae^{ikx}$. Selon la relation de de Broglie, l'impulsion p de la particule est $p = \hbar k$.

En mécanique non quantique, l'énergie mécanique, en l'absence d'énergie potentielle V(x), est donc: $E = E_{cin} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ c'est le résultat que nous avons obtenu de l'équation de Schrödinger. La théorie quantique nous donne un autre résultat très surprenant. Alors que l'impulsion p est exactement définie ($p = \hbar k$), la densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ est constante, quel que soit x. Nous ne savons pas où se trouve la particule, alors que nous avons une définition exacte de son impulsion.

Notez que nous avons fait la discussion avec $\psi(x) = Ae^{ikx}$, c'est-à-dire avec $k > 0$. Les résultats sont également valables si on considère $\psi(x) = Be^{-ikx}$. Le vecteur d'onde k est négatif et tous les autres résultats sont également valables.

Cas où $\psi(x) = e^{ikx} + e^{-ikx}$ ($A = B = 1$).

$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = 2 \cos(kx)$, la densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ vaut donc $|\psi(x)|^2 = 4 \cos^2(kx)$, la densité de probabilité est maximale en $kx = n\pi$, n entier, et nulle en $kx = (n + \frac{1}{2})\pi$. Donc, la particule est localisée aux maxima de $kx = n\pi$.

La fonction d'onde choisie est la superposition de deux ondes avec la même amplitude, l'une avec un vecteur d'onde $+k$ et l'autre avec le vecteur d'onde $-k$. Au vecteur $+k$ correspond l'impulsion $p_1 = \hbar k$ et à l'autre l'impulsion $p_2 = -\hbar k$. Que nous donne la mesure de l'impulsion de la particule ?

La physique quantique nous dicte que :

✓ Si nous faisons une seule mesure, la valeur de l'impulsion mesurée sera soit $p_1 = \hbar k$, soit $p_2 = -\hbar k$,

✓ Si nous faisons plusieurs mesures, il y aura statistiquement 50% de chance que ce soit p_1 et 50% que ce soit p_2 . Le fait qu'il y ait une probabilité de 50% est lié au fait que les amplitudes des ondes e^{ikx} et e^{-ikx} sont égales.

Notons ici un autre fait important, si $\psi(x) = e^{ikx} + e^{-ikx}$, la particule est "mieux" localisée que dans le cas $\psi(x) = e^{ikx}$. La densité de probabilité est maintenant maximale lorsque $kx = n\pi$. Par contre, il y a une incertitude sur la valeur de l'impulsion. On retrouve une relation entre la localisation de la particule et l'incertitude sur la mesure de son impulsion, c'est-à-dire la relation d'incertitude de Heisenberg.

4.4.3 Particule dans un puits de potentiel

Considérons un puits de potentiel $V(x)$ décrit sur la figure suivante :

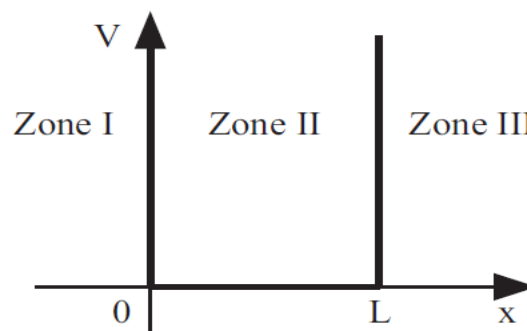


Figure 4-1 : Puit de potentiel

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L \\ +\infty, & x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger stationnaire est $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$. Il faut résoudre cette équation dans les trois zones. Dans la zone II, $V(x) = 0$ et l'équation de Schrödinger devient $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$. La solution, exprimée avec les fonctions cosinus et sinus, est $\psi(x) = C \sin(kx) + D \cos(kx)$ et l'énergie qui lui correspond est $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Dans les zones I et III, le potentiel V est infini. D'une manière intuitive, en regardant la forme de l'équation de Schrödinger, si V est infini, ψ doit être nul donc $\psi(x) = 0$ dans ces deux zones.

A ce stade, nous avons donc

$$\psi(x) = \begin{cases} C \sin(kx) + D \cos(kx) & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

Nous avons mentionné que la fonction $\psi(x)$ est une fonction continue. La condition de continuité en $x = 0$ implique que D vaut 0. La condition de continuité en $x = L$ implique que $kL = n\pi \Leftrightarrow k = \frac{n\pi}{L}$. Le vecteur k ne peut prendre que des valeurs discrètes $\frac{n\pi}{L}$. L'impulsion correspondante p vaut $p = p_n = \hbar k = \frac{n\hbar\pi}{L}$. On dit alors que k et p sont quantifiés. La quantification de k implique donc aussi la quantification de l'énergie E de la particule : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2L^2 m}$. L'énergie d'une particule dans un puit de potentiel de longueur L et de profondeur infinie est en niveaux discrets ($\frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2L^2 m}$), donc E varie comme n^2 . L'énergie est aussi quantifiée.

D'où viennent ces diverses quantifications ? Mathématiquement, elles viennent du fait que nous avons dû satisfaire des conditions aux limites, dans ce cas particulier la continuité de la fonction en $x = L$.

Normalisation de la fonction d'onde dans la zone II :

Dans la zone II, la fonction d'onde est $\psi(x) = C \sin(\frac{n\pi}{L}x)$. La condition de normalisation de la fonction d'onde est $\int_0^L |C|^2 \sin^2(\frac{n\pi}{L}x) dx = 1$ donc $|C|^2 \frac{L}{2} = 1$ et $C = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

La fonction d'onde normalisée est donc

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

et l'énergie vaut $E = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2 m}$

Quelles sont les propriétés physiques associées à la fonction d'onde $\psi(x)$ que nous venons de trouver ? Dans le cadre de la mécanique classique, l'énergie de la particule est continue depuis 0 jusqu'à ∞ . Dans le cadre de la mécanique quantique, l'énergie ne peut prendre que des valeurs discrètes. La séparation en énergie entre les niveaux $(n+1)$ et n vaut $E = (2n+1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2L^2 m}$

Dans la région $0 \leq x \leq L$, $\psi(x)$ est la superposition d'une onde $e^{in\frac{\pi x}{L}}$ et d'une onde $e^{-in\frac{\pi x}{L}}$. Une mesure unique de l'impulsion donne soit $\frac{n\hbar\pi}{L}$ soit $\frac{-n\hbar\pi}{L}$. Statistiquement, il y aura 50% de chance de trouver $\frac{n\hbar\pi}{L}$ et 50% de trouver $\frac{-n\hbar\pi}{L}$.

La densité de probabilité $|\psi(x)|^2$ vaut

$$|\psi(x)|^2 = \begin{cases} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) & 0 \leq x \leq L \\ 0, & x < 0 \text{ et } x > L \end{cases}$$

Pour des grandes valeurs de n (à part les oscillations), la densité de probabilité est "continue" entre 0 et L , comme dans le cas classique pour les grands n .

Chapitre 5 **Formalisme mathématique de la mécanique quantique**

5.1 Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons discuté l'existence de la dualité onde-corpuscule, aussi bien pour le rayonnement que pour les particules. Pour ces dernières nous pourrions dégager quatre exigences essentielles :

- ✓ L'existence d'une fonction d'onde dont le carré de l'amplitude représente la probabilité de présence de la particule en chaque point de l'espace.
- ✓ L'existence d'une sorte de "Principe fondamental de la mécanique quantique" qui est l'équation de Schrödinger dont les solutions sont justement les fonctions d'onde de la particule.
- ✓ L'existence d'une incertitude sur la mesure des grandeurs physiques qui est régie par le principe d'incertitude de Heisenberg.
- ✓ Enfin la quantification d'un certain nombre de grandeurs physiques telles que l'énergie, dont le spectre peut être discret.

Ces considérations montrent l'importance jouée par la fonction d'onde en physique quantique et il est donc nécessaire d'étudier les propriétés mathématiques de l'espace des fonctions d'onde et des opérateurs agissant sur ces fonctions à l'intérieur de cet espace.

Toutefois, nous ne prétendons pas présenter ici un formalisme mathématique complet et rigoureux, mais regrouper les diverses notions utiles en mécanique quantique telles que la notion de représentations, la notation de Dirac et l'algèbre des opérateurs.

5.2 Espace des fonctions d'onde d'une particule

5.2.1 Définition

$|\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ représente la probabilité pour que, à l'instant t , la particule soit trouvée dans un volume $d^3r = dx dy dz$ autour du point \vec{r} . La probabilité totale de trouver la particule dans tout l'espace est égale à l'unité, on doit avoir :

$$\sum_0^{+\infty} |\psi_i(\vec{r}, t)|^2 d^3 r_i = 1 \quad \text{dans le cas discontinu}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r = 1 \quad \text{dans le cas continue}$$

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

Pour simplifier davantage le formalisme on se limitera à un espace à une dimension, les résultats obtenus se généraliseront aisément dans \mathbb{R}^3 , c'est-à-dire $\psi(\vec{r})$ par $\psi(x)$

5.2.2.1 Définition :

Les fonctions d'ondes de carré sommable appartiennent à un espace vectoriel noté \mathcal{E} . Ainsi si les fonctions $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ appartiennent à \mathcal{E} et si λ_1 et λ_2 sont deux nombres complexes quelconques alors la fonction $\psi(x)$ donnée par:

$\psi(x) = \lambda_1 \psi_1(x) + \lambda_2 \psi_2(x)$ appartient également à \mathcal{E} . (Pour le montrer, il suffit de développer $|\psi(x)|^2$)

5.2.2.2 Produit scalaire

On définit le produit scalaire dans \mathcal{E} d'une fonction $\phi(x)$ par une fonction $\psi(x)$ par le nombre complexe note $\langle \phi | \psi \rangle$ et valant:

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

Les propriétés de ce produit scalaire sont :

- ✓ $\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$
- ✓ $\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1^* \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2^* \langle \phi | \psi_2 \rangle$
- ✓ $\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle$
- ✓ $\langle \phi | \psi \rangle = 0$ cette relation implique que les deux fonctions ϕ et ψ sont orthogonales
- ✓ $\langle \psi | \psi \rangle$ est un réel positif et $\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$ est la norme de ψ .

5.2.3 Base orthonormée complète discrète de \mathcal{E}

Définition

Soit un ensemble dénombrable de fonctions de carré sommable $u_i(x)$ avec $\{i=0,1, \dots, n, \dots\}$. Cet ensemble est orthonormé si : $\langle u_i | u_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i^*(x) u_j(x) dx = \delta_{ij}$ où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Il est complet si toute fonction $\psi(x)$ peut être développée d'une façon unique suivant les $u_i(x)$:

$$\psi(x) = \sum_0^{+\infty} c_i u_i(x)$$

Les coefficients c_i sont appelés composantes de $\psi(x)$ sur les $u_i(x)$

Les fonctions $u_i(x)$ satisfaisant les conditions précédentes forment alors une base orthonormée complète discrète.

5.2.4 Base orthonormée complète continue de \mathcal{L}

Définition

Une base orthonormée complète continue est constituée d'un ensemble de fonctions $v_\alpha(x)$ repérées par un indice α variant de façon continue et satisfaisant aux deux relations suivantes :

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

Remarque :

On remarque que pour $\beta = \alpha$, la fonction $v_\alpha(x)$ n'est pas de carré sommable et n'appartient donc pas à \mathcal{L} . Elle peut néanmoins servir de base pour les vecteurs de \mathcal{L} .

5.2.5 Composantes de $\psi(x)$

La composante c_i de $\psi(x)$ sur les fonctions $u_i(x)$ est donc égale au produit scalaire de $\psi(x)$ par $u_i(x)$ soit :

$$\langle u_j(x) | \psi(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x) \psi(x) dx = \sum_0^{+\infty} c_i \int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x) u_i(x) dx = \sum_0^{+\infty} c_i \delta_{ij} = c_j$$

(de la même manière on trouve $c_i = \int_{-\infty}^{+\infty} u_i^*(x) \psi(x) dx$)

Correspondance : base discrète-base continue :

$$i \leftrightarrow \alpha$$

$$\sum_i \leftrightarrow \int d\alpha$$

$$\delta_{ij} \leftrightarrow \delta(\alpha - \alpha')$$

5.2.6 Exemples de Bases continues

5.2.6.1 Les fonctions delta

C'est l'ensemble des fonctions localisées aux différents points x_0 : $v_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ centrées aux divers points x_0 , le coefficient multipliant la fonction $\delta(x - x_0)$ centrée au point x_0 étant la valeur de $\psi(x)$ en x_0 .

On écrit souvent pour alléger le formalisme :

$$\psi(x) = \langle x | \psi(x) \rangle$$

C'est la représentation de $\{x\}$

5.2.6.2 Les ondes planes :

C'est l'ensemble des fonctions définies par : $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ip\frac{x}{\hbar}}$

p est une composante de l'impulsion qui joue le rôle de α et qui varie de $-\infty$ à $+\infty$. Les $v_p(x)$ vérifient les relations d'orthogonalité et de fermeture. On a en effet :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} v_p^*(x) v_{p'}(x) dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p'-p)\frac{x}{\hbar}} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p'-p)u} du = \delta(p - p')$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} v_p(x) v_p^*(x') dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x')\frac{p}{\hbar}} dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(x-x')k} dk = \delta(x - x')$$

Où $u = \frac{x}{\hbar}$ et $k = \frac{p}{\hbar}$ le résultat des intégrales découlant des transformées de Fourier des fonctions de Dirac.

Les $v_p(x)$ forment donc une base orthonormée complète continue et toute fonction $\psi(x)$ se développe de façon unique suivant les $v_p(x)$: $\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c_p v_p(x) dp$

avec :

$$c_p = \langle v_p(x) | \psi(x) \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip\frac{x}{\hbar}} \psi(x) dx = \bar{\psi}(p)$$

$\bar{\psi}(p)$ n'est autre que la transformée de Fourier de $\psi(x)$, de sorte qu'on a :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) v_p(x) dp$$

On retrouve donc le résultat bien connu de transformées de Fourier: toute fonction $\psi(x)$ peut être considérée comme une superposition linéaire d'ondes planes, le coefficient multipliant l'onde plane étant la transformée de Fourier $\bar{\psi}(p)$ de $\psi(x)$.

On écrit souvent pour simplifier le formalisme :

$$\bar{\psi}(p) = \langle p | \psi(x) \rangle \text{ ou } (\bar{\psi}(p) = \langle p | \psi \rangle)$$

C'est la représentation de $\{p\}$

5.3 Espace d'états - Notations de Dirac

5.3.1 Définition

Choisir une représentation, c'est se donner une base orthonormée complète (discrète ou continue) suivant laquelle se décompose chaque fonction de \mathcal{L} . Ainsi une même fonction peut être représentée par plusieurs ensembles de coordonnées $(c_i, \psi(x), \bar{\psi}(p), \dots)$. Pour s'affranchir de la base on peut, comme en géométrie euclidienne, représenter l'état quantique de la particule par un vecteur appartenant à un espace vectoriel qu'on appelle espace des états de la particule et qu'on peut l'appeler ξ .

On notera $|\psi\rangle$ ce vecteur et on l'appellera vecteur "ket" : C'est la notation de Dirac dont on verra la commodité tout au long de ce cours.

5.3.2 Vecteur « bra » et vecteur « ket »

On représente le vecteur ket $|\psi\rangle$ dans une base donnée en rangeant ses coordonnées verticalement sous la forme d'une matrice à une colonne et à plusieurs lignes :

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi(x) \\ \vdots \\ \psi(x^i) \end{bmatrix}$$

A chaque vecteur ket $|\psi\rangle$ on associe un nouvel être note $\langle\psi|$ qu'on appelle vecteur bra. Ses coordonnées dans une représentation donnée sont les complexes conjugués des coordonnées de $|\psi\rangle$ dans la même représentation : On les range horizontalement sous forme d'une matrice à une ligne et à plusieurs colonnes.

$$\langle\psi| = |c_1^* \ c_2^* \ \dots \ c_i^*| = |\psi^*(x) \ \psi^*(x') \ \dots \ \psi^*(x^i)|$$

L'ensemble des vecteurs bras constitue un espace qu'on note ξ^* et qu'on appelle espace dual de ξ .

5.3.3 Correspondance entre ket et bra

A tout ket correspond un bra et la correspondance est antilinéaire :

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \Rightarrow \langle\psi| = \lambda_1^* \langle\psi_1| + \lambda_2^* \langle\psi_2|$$

Comme $|\lambda \psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$ alors $\langle\lambda\psi| = \lambda^* \langle\psi|$

Cette correspondance est à la base des propriétés du produit scalaire défini précédemment.

A tout bra ne correspond pas nécessairement un ket, car de façon générale l'espace dual ξ^* de ξ ne lui est pas isomorphe.

5.3.4 Extension à ξ des différentes notions définies sur \mathfrak{F}

Nous allons reprendre dans ξ , toutes les notions définies dans \mathfrak{F} , et ceci en utilisant la notation de Dirac.

Un ensemble discret $\{|u_i(x)\rangle\}$ ou continu $\{|u_\alpha(x)\rangle\}$ constitue une base si tout état appartenant à ξ se développe d'une façon unique suivant les $|u_i(x)\rangle$ ou les $|u_\alpha(x)\rangle$.

Base discrète :

On a les propriétés suivantes : $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$ et $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$ avec $c_i = \langle u_i | \psi \rangle$

$\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = 1$ où 1 est l'opérateur identité. Cette relation traduit le fait que $\{|u_i(x)\rangle\}$ constitue une base.

Base continue :

On a les propriétés suivantes :

$$\langle u_\alpha | u_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \text{ et } |\psi\rangle = \int c(\alpha) |u_\alpha\rangle d\alpha \text{ avec } c(\alpha) = \langle u_\alpha | \psi \rangle$$

$\int |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha| d\alpha = 1$, cette valeur traduit le fait que $\{|u_\alpha(x)\rangle\}$ constitue une base.

5.4 Opérateurs linéaires

5.4.1 Définition

Un opérateur linéaire A fait correspondre à tout ket $|\psi\rangle$ appartenant à ξ un autre ket $|\psi'\rangle$ appartenant à ξ . La correspondance étant linéaire :

$$|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \text{ et } A (\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 A |\psi_1\rangle + \lambda_2 A |\psi_2\rangle$$

Exemples :

Opérateur X : $\psi(x) \longrightarrow x\psi(x)$

Opérateur P : $\psi(x) \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$

Opérateur π : $\psi(x) \longrightarrow \psi(-x)$

L'action de chacun de ces opérateurs étant définie dans la représentation $\{x\}$.

5.4.2 Produit de deux opérateurs – Commutateur

Le produit de deux opérateurs linéaires A et B, noté AB est défini de la façon suivante :

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

B agit d'abord, A ensuite.

En général, le produit AB est différent de produit BA.

On définit le commutateur de A et B qu'on note $[A, B]$ par l'opérateur :

$$[AB] = AB - BA$$

Si $[AB] = 0$, on dit que les deux opérateurs commutent.

Exemple : Commutateur : $[X, P]$

Dans la représentation $\{x\}$ on a :

$$XP \psi(x) = x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$PX \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) = \frac{\hbar}{i} \psi(x) + \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$$

$$(XP - PX)\psi(x) = \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) - \frac{\hbar}{i} \psi(x) - \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) = -\frac{\hbar}{i} \psi(x)$$

ψ étant quelconque, on aura : $[X, P] = i\hbar$

5.4.3 Représentation d'un opérateur par une matrice

On appelle éléments de matrice de l'opérateur A dans la base orthonormée complète discrète $\{u_i\}$ les nombres complexes A_{ij} tels que :

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

Si on connaît les coordonnées c_i de $|\psi\rangle$, on peut en déduire les coordonnées c'_i de $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

En effet on a : $|\psi\rangle = \sum c_i |u_i\rangle$ et $|\psi'\rangle = \sum c'_i |u_i\rangle$

$$\text{Et } c'_j = \langle u_j | \psi' \rangle = \langle u_j | \sum c_i A | u_i \rangle = \sum_i \langle u_j | A | u_i \rangle c_i = \sum_i A_{ji} c_i$$

Soit $c'_i = \sum_j A_{ij} c_j$

L'équation $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ s'écrit donc sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} c'_1 \\ \vdots \\ c'_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

Le même formalisme peut se concevoir dans la base continue $\{u_\alpha\}$; on aura en effet :

$$A_{\alpha\alpha'} = \langle u_\alpha | A | u_{\alpha'} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_\alpha^*(x) [A u_{\alpha'}(x)] dx \quad \text{et } c_{\sigma'} = \int A_{\alpha\sigma'} c_\alpha d\alpha$$

5.4.4 Exemple d'opérateur linéaire : Le projecteur

On appelle projecteur sur l'état normé $|\psi\rangle$ l'opérateur P_ψ défini par : $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

P_ψ est bien un opérateur, car dans une base donnée, il est représenté par une matrice. On a en effet dans la base $\{u_i\}$:

$$P_\psi = \begin{bmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^* & \cdots & c_n^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 c_1^* & \cdots & c_1 c_n^* \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_n c_1^* & \cdots & c_n c_n^* \end{bmatrix}$$

Faisons agir P_ψ sur un ket $|\phi\rangle$ quelconque, on a :

$$P_\psi |\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \lambda |\psi\rangle$$

L'interprétation géométrique de P_ψ est donc la suivante : P_ψ agissant sur un ket $|\phi\rangle$ donne un ket proportionnel à $|\psi\rangle$, le coefficient de proportionnalité étant le produit scalaire $\langle\psi|\phi\rangle$ c'est à dire la projection de $|\phi\rangle$ sur $|\psi\rangle$: P_ψ est donc l'opérateur projection orthogonale sur le ket $|\psi\rangle$.

5.4.5 Relation de fermeture

Considérons dans la base orthonormée complète discrète $\{u_i\}$ l'opérateur $P_{\{u_i\}}$ défini par :

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$$

Faisons agir cet opérateur sur un ket $|\psi\rangle$, on obtient :

$$P_{\{u_i\}}|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i||\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

On a donc quelque soit $|\psi\rangle$: $P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$, cette relation est connue sous le nom de « Relations de Fermeture ».

5.4.6 Application de la relation de fermeture : changement de base

Il s'agit de déterminer les composantes d'un vecteur, les éléments de matrice d'un opérateur ou la forme de certaines expressions mathématiques dans un changement de base. Pour simplifier on considère qu'on passe d'une base orthonormée discrète $\{|u_i\rangle\}$ à une base orthonormée discrète $\{|w_l\rangle\}$ telle que : $\langle u_i|w_l\rangle = S_{il}$ et donc $\langle w_l|u_i\rangle = S_{il}^*$

Les relations de fermeture s'écrivent dans les deux bases :

$$P_{\{u_i\}} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = 1$$

$$P_{\{w_l\}} = \sum_l |w_l\rangle\langle w_l| = 1$$

5.4.6.1 Transformation des composantes d'un vecteur :

Soit le vecteur $|\psi\rangle$ est définie :

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ par ses coordonnées $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$

Dans la base $\{|w_l\rangle\}$ par ses coordonnées $b_l = \langle w_l|\psi\rangle$

On a dans la base $\{|w_l\rangle\}$

$$b_l = \langle w_l|\psi\rangle = \langle w_l|P_{\{u_i\}}|\psi\rangle = \langle w_l|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i||\psi\rangle = \sum_i \langle w_l|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$$

Soit

$$b_l = \sum_i S_{il}^* c_i$$

5.4.6.2 Transformation des éléments de matrice d'un opérateur A :

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$ les éléments de matrice de A sont $A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$

Dans la base $\{|w_l\rangle\}$ les éléments de matrice de A sont $A_{lm} = \langle w_l|A|w_m\rangle$

On a dans la base $\{|w_l\rangle\}$

$$\begin{aligned}
A_{lm} &= \langle w_l | P_{\{u_i\}} A P_{\{u_j\}} | w_m \rangle = \langle w_l | \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| A \sum_j |u_j\rangle \langle u_j| w_m \rangle \\
&= \sum_i \sum_j \langle w_l | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | w_m \rangle
\end{aligned}$$

Soit

$$A_{lm} = \sum_i \sum_j S_{il}^* A_{ij} S_{jm}$$

5.5 Opérateurs adjoints

5.5.1 Définitions

Deux opérateurs A et A^+ sont dits adjoints si les matrices qui les représentent dans une base donnée $\{|u_i\rangle\}$ sont adjointes l'une de l'autre, c'est à dire si l'on a :

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

Cette définition se généralise pour deux kets $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ quelconques :

$$\langle \phi | A^+ | \psi \rangle = \langle \psi | A | \phi \rangle^*$$

Une autre définition de l'opérateur A^+ adjoint de A est : $|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \Leftrightarrow \langle \psi'| = \langle \psi | A^+$

5.5.2 Propriétés

En utilisant les définitions précédentes on montre aisément que :

$$(A^+)^+ = A$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+$$

Cette dernière propriété se démontre en écrivant que $|\psi'\rangle = AB |\psi\rangle$ et en posant $|\phi\rangle = B |\psi\rangle$ il vient alors : $|\psi'\rangle = A |\phi\rangle$ ce qui implique que $\langle \psi'| = \langle \phi | A^+$

Soit :

$$\langle \psi'| = \langle \psi | B^+ A^+ = \langle \psi | (AB)^+$$

5.5.3 Règles de conjugaison

Pour obtenir l'expression conjuguée d'une expression donnée il faut :

- ✓ Renverser l'ordre des termes.
- ✓ Remplacer ket par bra et réciproquement.
- ✓ Prendre le complexe conjugué des constantes.
- ✓ Remplacer les opérateurs par leurs adjoints.

Ainsi par exemple, l'expression conjuguée de $\lambda AB |\psi\rangle$ est $\lambda^* \langle \psi | B^\dagger A^\dagger$

5.6 Opérateurs hermétiques

5.6.1 Définitions

Un opérateur A est hermétique s'il est égal à son adjoint c'est à dire si : $A = A^\dagger$. Il s'ensuit que les éléments de matrice de A dans une représentation donnée $\{u_i\}$ sont tels que :

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

et plus généralement pour deux kets $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ quelconques :

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

En utilisant les propriétés des adjoints, on peut également écrire :

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

Exemple d'opérateur

Pour l'opérateur projecteur $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, la démonstration est immédiate, on a en effet : $P_\psi^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$

Remarque

Le produit de deux opérateurs hermétiques n'est hermétique que si A et B commutent:

En effet : $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$ donc BA n'est égal à AB que si $[A, B] = 0$

5.6.2 Vecteurs propres et valeurs propres d'un operateur

5.6.2.1 Définition

On dit que $|\phi_n\rangle$ est vecteur propre ou ket propre de l'opérateur A avec la valeur propre a_n si : $A|\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle$

Remarques

$A|u_n\rangle = a_n |u_n\rangle$ implique que $\langle u_n|A^\dagger = a_n^* \langle u_n|$. Ainsi, si $|u_n\rangle$ est ket propre de A avec la valeur propre a_n , $\langle u_n|$ est bra propre de A^\dagger avec la valeur propre a_n^*

5.6.2.2 Équation caractéristique

Pour déterminer les valeurs propres λ d'un opérateur A, il faut chercher s'il existe des vecteurs $|\psi\rangle$ tel que : $A|\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$

La projection de cette égalité sur une base orthonormée $\{|u_i\rangle\}$ donne :

$$\langle u_i| A|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle = \lambda c_i$$

En insérant le projecteur $P\{|u_i\rangle\}$ entre A et $|\psi\rangle$ on obtient :

$$\langle u_i| A \sum_j |u_j\rangle \langle u_j|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i| A|u_j\rangle \langle u_j|\psi\rangle = \sum_j A_{ij} c_j$$

Soit

$$\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i$$

Ou encore

$$\sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) c_j = 0$$

On aura un système d'équations linéaires homogènes qui admet une solution différente de zéro si et seulement si le déterminant correspondant est nul, soit : $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0$

L'équation de degré n en λ , obtenue en annulant le déterminant est appelée équation caractéristique. Ses racines λ sont les valeurs propres de l'opérateur A.

5.6.3 Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur hermétique

5.6.3.1 Les valeurs propres d'un opérateur hermétique sont réelles

En effet si on a : $A|\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle$ alors : $\langle\phi_n|A^\dagger = a_n^* \langle\phi_n|$.

En projetant ces équations sur $|\phi_n\rangle$ il vient :

$$\langle\phi_n|A|\phi_n\rangle = a_n \langle\phi_n|\phi_n\rangle = a_n \text{ et } \langle\phi_n|A^\dagger|\phi_n\rangle = a_n^* \langle\phi_n|\phi_n\rangle = a_n^* .$$

Comme $A = A^\dagger$, on obtient $a_n = a_n^*$, a_n est donc une valeur propre réelle et par conséquent :

$$\langle\phi_n|A = \langle\phi_n| a_n$$

Ce qui montre que, si $|\phi_n\rangle$ est ket propre de A avec la valeur propre a_n , $\langle\phi_n|$ est bra propre de A avec la même valeur propre a_n .

5.6.3.2 Deux vecteurs propres correspondant à des valeurs propres différentes sont orthogonaux

Soient deux vecteurs propres $\langle\phi_m|$ et $|\phi_n\rangle$ de A correspondant aux valeurs propres différentes a_n et a_m :

On a : $A|\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle$ et $\langle\phi_m|A = a_m \langle\phi_m|$

En multipliant la première par $\langle\phi_m|$ à gauche et la deuxième par $|\phi_n\rangle$ à droite, on obtient:

$$\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle = a_n \langle\phi_m|\phi_n\rangle \text{ et } A\langle\phi_m|A|\phi_n\rangle = a_m \langle\phi_m|\phi_n\rangle$$

En retranchant membre à membre, on trouve $(a_n - a_m) \langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0$

Comme $a_n \neq a_m$ donc $\langle\phi_m|\phi_n\rangle = 0$ et $|\phi_n\rangle$ et $|\phi_m\rangle$ sont orthogonaux.

5.7 Observables

5.7.1 Définitions

Une observable est un opérateur hermétique dont le système de vecteurs propres $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ est non seulement orthonormé mais complet ; c'est-à-dire qu'on a toujours :

$$\langle u_{n'}^{\alpha'} | u_n^\alpha \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$\sum_n \sum_\alpha |u_n^\alpha\rangle \langle u_n^\alpha| = 1$$

Les $\{|u_n^\alpha\rangle\}$ peuvent alors servir de base dans l'étude du système considéré.

5.7.2 Exemples d'observables :

5.7.2.1 Le projecteur P_ψ :

Le projecteur $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ est hermétique et on a : $P_\psi^2 = P_\psi$: les valeurs propres λ de P_ψ sont réelles et sont données par : $\lambda^2 = \lambda$, soit $\lambda = 1$ ou $\lambda = 0$

La valeur propre $\lambda = 1$ est simple et lui correspond le vecteur propre $|\psi_1\rangle$ alors que $\lambda = 0$ est dégénérée et lui correspond l'ensemble des vecteurs orthonormés sous-tendant le sous-espace orthogonal à $|\psi_1\rangle$. Les vecteurs propres de P_ψ forment donc un système complet et P_ψ est une observable.

5.7.2.2 Operateur P :

P est hermétique et son équation aux valeurs propres dans la représentation $\{x\}$ est :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \varphi_{p'}(x) = p' \varphi_{p'}(x)$$

$\varphi_{p'}(x)$ est la fonction propre de P correspondant à la valeur propre p' .

La solution de l'équation est : $\varphi_{p'}(x) = A e^{(ip'x/\hbar)}$

Où A est un coefficient de normalisation et nous avons montré que si : $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ alors l'ensemble des $\varphi_{p'}(x)$ constitue une base orthonormée complète. L'opérateur P est donc bien une observable.

En notation de Dirac $|p'\rangle$ est le ket qui correspond à la fonction $\varphi_{p'}(x)$, l'équation aux valeurs propres s'écrit : $p|p'\rangle = p'|p'\rangle$

Les relations d'orthogonalités et de fermeture s'écrivent dans la base $\{|p'\rangle\}$:

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \text{ et } \int dp |p\rangle\langle p| = 1$$

5.7.3 Observables qui commutent

Théorème : « Si deux observables A et B commutent, on peut toujours trouver un système de vecteurs propres communs et réciproquement ».

Soit $|\phi_n^\alpha\rangle$ un ket propre de A avec la valeur propre a_n , on a $A|\phi_n^\alpha\rangle = a_n|\phi_n^\alpha\rangle$

Comme A et B commutent, il vient : $AB|\phi_n^\alpha\rangle = BA|\phi_n^\alpha\rangle = a_n B|\phi_n^\alpha\rangle$

soit : $A(B|\phi_n^\alpha\rangle) = a_n (B|\phi_n^\alpha\rangle)$

$B|\phi_n^\alpha\rangle$ est donc ket propre de A avec la même valeur propre a_n .

On distingue alors deux cas

✓ a_n est une valeur propre non dégénérée :

Dans ce cas $|\phi_n^\alpha\rangle$ et $B|\phi_n^\alpha\rangle$ ne peuvent différer que par un facteur multiplicatif, l'indice α n'est plus nécessaire et on a : $B|\phi_n\rangle = b_n |\phi_n\rangle$ qui est ket propre de A avec la valeur propre a_n est aussi ket propre de B avec une valeur propre b_n généralement différente de a_n .

✓ a_n est une valeur propre dégénérée :

Dans ce cas $B|\phi_n^\alpha\rangle$ appartient au sous-espace de dégénérescence ξ_n sous-tendu par les $\{|\phi_n^\alpha\rangle\}$. ξ_n est donc invariant sous l'action de B.

Soit $|w_{n,m}^\beta\rangle$ les vecteurs propres de B, de valeur propre b_m contenus dans ξ_n .

On a : $B|w_{n,m}^\beta\rangle = b_m|w_{n,m}^\beta\rangle$

L'indice β distingue les différents vecteurs propres correspondant à b_m lorsque cette dernière est dégénérée.

$|w_{n,m}^\beta\rangle$ est ket propre de B avec la valeur propre b_m , comme il appartient à ξ_n il est également ket propre de A avec la valeur propre a_n : il est donc ket propre commun à A et B.

En résumé, une observable A, a en général un spectre en partie discret (a_n) et en partie continue (a_v) on admettra les relations d'orthogonalité et de fermeture suivante :

$$\langle u_n | u_{n'} \rangle = \delta_{nn'}$$

$$\langle u_v | u_{v'} \rangle = \delta(v - v')$$

$$\langle u_v | u_v \rangle = 0$$

$$\sum |u_n\rangle\langle u_n| + \int |u_v\rangle\langle u_v| dv = 1$$

5.8 Opérateurs unitaires

5.8.1 Définition

Un opérateur U est unitaire si son inverse U^{-1} est égal à son adjoint :

$$UU^+ = U^+U = 1$$

5.8.2 Transformation sur les vecteurs

Le transformé $|\phi'_1\rangle$ d'un ket $|\phi_1\rangle$ par une transformation unitaire associée à l'opérateur U est défini par : $|\phi'_1\rangle = U |\phi_1\rangle$. On a alors le vecteur bra $\langle\phi'_1| = \langle\phi_1|U^+$.

On en déduit que :

$$\langle\phi'_1|\phi'_1\rangle = \langle\phi_1|U^+U|\phi_1\rangle = \langle\phi_1|\phi_1\rangle$$

Une transformation unitaire conserve donc la norme et le produit scalaire

5.8.3 Transformation sur les operateurs

Soit l'équation $|\psi\rangle = A |\phi\rangle$, il s'agit de déterminer l'opérateur A' tel que : $|\psi'\rangle = A' |\phi'\rangle$, où $|\psi'\rangle$ et $|\phi'\rangle$ sont respectivement les vecteurs transformés de $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ par la transformation unitaire associée à l'opérateur U on a : $|\psi'\rangle = U |\psi\rangle$ et $|\phi'\rangle = U |\phi\rangle$

par conséquent on aura $U |\psi\rangle = A'U |\phi\rangle$.

En multipliant à gauche les deux membres par U^+ , on obtient : $U^+U |\psi\rangle = U^+A'U|\phi\rangle$.

Soit :

$$|\psi\rangle = U^+A'U|\phi\rangle = A|\phi\rangle$$

Ce qui donne : $A = U^+A'U$ ou encore $A' = UAU^+$

Propriétés :

- ✓ Si A est hermétique A' l'est aussi
- ✓ Les valeurs propres de A' sont celles de A , car l'équation aux valeurs propres $A|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$ se transforme en $A|\phi'\rangle = \lambda|\phi'\rangle$.
- ✓ Le produit de deux transformations unitaires U et V est une transformation unitaire.

En effet comme : $UU^+ = U^+U = 1$ et $VV^+ = V^+V = 1$

il vient : $(UV)(UV)^+ = UVV^+U^+ = 1$

- ✓ Les éléments de matrice de U dans une base orthonormée discrète $\{|v_n\rangle\}$ sont tels que:

$$\sum_l U_{li}^* U_{lj} = \delta_{ij}$$

En effet on a : $\langle v_i|U^+U|v_j\rangle = \langle v_i|v_j\rangle \delta_{ij}$

En insérant la relation de fermeture entre U et U^+ , on a :

$$\langle v_i | U^+ U | v_j \rangle = \sum_l \langle v_i | U^+ | v_l \rangle \langle v_l | U | v_j \rangle = \sum_l U_{li}^+ U_{lj} = \sum_l U_{li}^* U_{lj}$$

Soit :

$$\sum_l U_{li}^* U_{lj} = \delta_{ij}$$

Ce qui montre que :

Lorsqu'une matrice est unitaire, la somme des produits des éléments d'une colonne par les complexes conjugués des éléments d'une autre colonne est nulle si les deux colonnes sont différentes et égale à un dans le cas contraire.

5.9 Produit tensoriel d'espaces d'états

5.9.1 Définition

Soit un espace ξ_1 de dimension n_1 sous-tendu par les vecteurs de base $|u_i(1)\rangle$ ($i = 1, \dots, n_1$) dont le vecteur le plus général est désigné $|\phi(1)\rangle$ et un espace ξ_2 de dimension n_2 sous-tendu par les vecteurs de base $|v_l(2)\rangle$ ($l = 1, \dots, n_2$) et de vecteur général $|\omega(2)\rangle$.

On appelle produit tensoriel de ξ_1 par ξ_2 , l'espace vectoriel ξ à $n_1 n_2$ dimensions, tel ce produit est noté par : $\xi = \xi_1 \otimes \xi_2$

On a pour tout couple de vecteurs $|\phi(1)\rangle$ et un espace ξ_1 et $|\omega(2)\rangle$ appartenant à ξ_2 , on peut faire correspondre un vecteur $|\psi\rangle$ de ξ noté $|\psi\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle$ qu'on appelle produit tensoriel de $|\phi(1)\rangle$ et $|\omega(2)\rangle$.

Pour simplifier, on note aussi : $|\psi\rangle = |\phi(1)\omega(2)\rangle$

5.9.2 Propriétés

Le produit tensoriel satisfait aux propriétés suivantes :

- ✓ Il est associatif par rapport à la multiplication par un scalaire :

$$\lambda[|\phi(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle] = [\lambda|\phi(1)\rangle] \otimes |\omega(2)\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes [\lambda|\omega(2)\rangle]$$

- ✓ Il est distributif par rapport à l'addition vectorielle :

$$[|\phi(1)\rangle \otimes [\lambda_1|\omega_1(2)\rangle + \lambda_2|\omega_2(2)\rangle]] = \lambda_1|\phi(1)\rangle \otimes |\omega_1(2)\rangle + \lambda_2|\phi(1)\rangle \otimes |\omega_2(2)\rangle$$

- ✓ L'ensemble des vecteurs $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle\}$ constitue une base orthonormée dans ξ .

En effet on a :

$$\langle u_i(1) | \otimes \langle v_l(2) | [|u_j(1)\rangle \otimes |v_m(2)\rangle] = \langle u_i(1) | u_j(1) \rangle \langle v_l(2) | v_m(2) \rangle = \delta_{ij} \delta_{lm}$$

5.9.3 Composantes d'un vecteur produit

Soient a_i et b_l les composantes de $|\phi(1)\rangle$ et $|\omega(2)\rangle$ respectivement dans les bases $\{|u_i(1)\rangle\}$ et $\{|v_l(2)\rangle\}$, on a : $|\phi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle$ et $|\omega(2)\rangle = \sum_l b_l |v_l(2)\rangle$

D'après les propriétés précédentes on aura :

$$|\psi\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle = \sum_i \sum_l a_i b_l |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$$

Les composantes d'un vecteur produit tensoriel sont donc les produits des composantes des deux vecteurs du produit.

5.9.4 Produit scalaire dans ξ

Soient les vecteurs : $|\psi\rangle = |\phi(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle$ et $|\psi'\rangle = |\phi'(1)\rangle \otimes |\omega'(2)\rangle$.

On définit leur produit scalaire par : $\langle \psi | \psi' \rangle = \langle \phi(1) | \phi'(1) \rangle \otimes \langle \omega(2) | \omega'(2) \rangle$

5.9.5 Produit tensoriel de deux opérateurs A (1) et B (2)

Soient A (1) et B (2) deux opérateurs agissant dans ξ_1 et ξ_2 . On appelle produit tensoriel de ces deux opérateurs qu'on note $A(1) \otimes B(2)$ un opérateur agissant dans l'espace produit et défini ainsi : $[A(1) \otimes B(2)] [|\phi(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle] = [A(1)|\phi(1)\rangle] \otimes [B(2)|\omega(2)\rangle]$

Lorsque $A(1) \otimes B(2)$ agit sur un vecteur produit, chaque opérateur du produit agit sur le vecteur du produit appartenant à l'espace dans lequel il agit.

On vérifie facilement que : $\tilde{A}(1) = A(1) \otimes I(2)$ et $\tilde{B}(2) = I(1) \otimes B(2)$ où $I(1)$ et $I(2)$ sont les opérateurs identités respectivement dans ξ_1 et ξ_2 .

On note aussi pour simplifier : $A(1) \otimes B(2) = A(1)B(2)$

5.9.6 États propres et valeurs propres de $\tilde{A}(1)$

On a :

$$A(1) |\phi_n(1)\rangle = a_n |\phi_n(1)\rangle$$

$$\tilde{A}(1) [|\phi_n(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle] = [A(1) |\phi_n(1)\rangle] \otimes |\omega(2)\rangle = a_n [|\phi_n(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle]$$

$|\phi_n(1)\rangle \otimes |\omega(2)\rangle$ est donc état propre de $\tilde{A}(1)$ avec la valeur propre a_n .

$$\text{De même : } \tilde{A}(1) [|\phi_n(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle] = a_n [|\phi_n(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle]$$

Les $|v_l(2)\rangle$ formant une base orthonormée dans ξ_2 , on voit qu'il existe au moins n_2 vecteurs orthogonaux $|\phi_n(1)\rangle \otimes |v_l(2)\rangle$ ($l=1, \dots, n_2$) qui sont états propres de $\tilde{A}(1)$ avec la valeur propre a_n . Ainsi, même si a_n n'est pas dégénérée pour $A(1)$ dans ξ_1 , elle est dégénérée au moins n_2 fois pour $\tilde{A}(1)$ dans l'espace ξ .

5.9.7 États propres et valeurs propres de $\tilde{A}(1) + \tilde{B}(2)$

On a :

$$A(1) |\phi_n(1)\rangle = a_n |\phi_n(1)\rangle$$

$$B(2) |w_m(2)\rangle = b_m |w_m(2)\rangle$$

On a d'après ce qui précède, il vient :

$$\tilde{A}(1) [|\phi_n(1)\rangle \otimes |w_m(2)\rangle] = a_n [|\phi_n(1)\rangle \otimes |w_m(2)\rangle]$$

$$\tilde{B}(1) [|\phi_n(1)\rangle \otimes |w_m(2)\rangle] = b_m [|\phi_n(1)\rangle \otimes |w_m(2)\rangle]$$

On en déduit que :

$$(\tilde{A}(1) + \tilde{B}(1)) [|\phi_n(1)\rangle \otimes |w_m(2)\rangle] = (a_n + b_m) [|\phi_n(1)\rangle \otimes |w_m(2)\rangle]$$

Les états propres de $\tilde{A}(1) + \tilde{B}(1)$ sont les produits tensoriels d'un état propre de $A(1)$ par un état propre de $B(2)$ et les valeurs propres de $\tilde{A}(1) + \tilde{B}(1)$ sont la somme des valeurs propres correspondantes de $A(1)$ et $B(2)$.

Chapitre 6 Postulats de la mécanique quantique

6.1 Introduction :

En mécanique classique l'état d'une particule à un instant donné est complètement défini lorsqu'on connaît son vecteur position \vec{r} et son vecteur quantité de mouvement \vec{p} . De plus comme toutes les grandeurs physiques associées à cette particule s'expriment en fonction de \vec{r} et \vec{p} , on peut les mesurer avec toute la précision nécessaire sans perturber le mouvement de la particule. Enfin si l'on connaît les forces qui s'exercent sur la particule en chaque point de l'espace, on peut, en résolvant les équations de Newton, prédire sa position et sa vitesse à tout instant ultérieur. Il en est de même pour l'état d'un système matériel qui est complètement déterminé si l'on connaît en fonction du temps la position et la vitesse de chacun de ses points.

A l'échelle quantique nous avons vu qu'on ne peut mesurer simultanément la position et la vitesse de la particule et ce fait ne provient pas de la précision limitée des instruments de mesure mais des propriétés de la nature elle-même, exprimées par les relations d'incertitude de Heisenberg. La position et la quantité de mouvement d'une particule ne caractérisent plus son état puisqu'on ne peut plus les mesurer simultanément et définir ainsi une trajectoire.

A la description classique en termes de position et d'impulsion il faut donc substituer une description quantique en termes d'autres données représentatives de l'état du système et des grandeurs physiques qui lui sont associées. Ces données ont déjà été introduites de façon qualitative et partielle dans les chapitres précédents : ce sont la fonction d'onde et les opérateurs que nous avons vu dans le cadre du formalisme mathématique (chapitre 5).

6.2 Énoncé de postulats

6.2.1 Description de l'état physique

Pour un état quantique, il est équivalent de se donner $|\psi\rangle \in \xi$ ou la fonction d'onde correspondante $\psi(r) = \langle r | \psi \rangle$ d'où :

1^{er} postulat

A un instant t_0 fixé, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un "ket" $|\psi(t_0)\rangle \in \xi$. Ce premier postulat implique un principe de superposition : une combinaison linéaire de vecteurs d'état est un vecteur d'état : si $|\psi_i\rangle \in \xi$, alors $|\psi\rangle = \sum c_i |\psi_i\rangle \in \xi$

6.2.2 Description des grandeurs physiques

En mécanique quantique, un état est représenté par un vecteur, une grandeur physique par un opérateur.

2^{eme} postulat

Toute grandeur physique mesurable \mathcal{A} est décrite par un opérateur A agissant dans ξ ; cet opérateur est une observable.

6.2.3 Mesure des grandeurs physiques

6.2.3.1 Résultats possibles

On a déjà vu que dans le cas d'une particule quantique, les seules énergies possibles sont les valeurs propres de l'opérateur H . D'où l'extension à toutes les grandeurs physiques :

3^{eme} postulat

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

Remarques :

- ✓ Une mesure de \mathcal{A} donnera toujours une valeur réelle, puisque A est par définition hermétique.
- ✓ Si le spectre de A est discret, les résultats de la mesure de \mathcal{A} sont quantifiés.

6.2.3.2 Principe de décomposition spectrale

La prédiction du résultat de la mesure à un instant donné, d'une grandeur physique \mathcal{A} d'un système, à laquelle est associée l'observable A est du type probabiliste.

4^{eme} postulat : (cas d'un spectre discret)

Lorsqu'on mesure la grandeur physique \mathcal{A} sur un système dans l'état normé $|\psi\rangle$, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre a_n de l'observable A correspondante vaut : $P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2$ car $(|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$

- ✓ g_n est le degré de dégénérescence de a_n
- ✓ $\{|u_n^i\rangle\}$ ($i=1,2,\dots,g_n$) est un système orthonormé de vecteurs propres associé à a_n sous-tendant le sous espace ξ_n .

Remarque :

- ✓ Si $g_n = 1$ (le spectre discret est non dégénéré) ; alors : $P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2$

où $|u_n\rangle$ est le vecteur propre normé de A associé à a_n .

- ✓ Si le spectre est continu et non dégénéré :

La probabilité $dP(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ vaut : $dP(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$ où $|v_\alpha\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre α de l'observable A associée à la grandeur physique \mathcal{A} .

- ✓ Autre écriture de $P(a_n)$:

$$P(a_n) = \langle \psi | P_n | \psi \rangle$$

où P_n est le projecteur sur le sous espace ξ_n : $P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$

6.2.3.3 Réduction du paquet d'onde

Lorsqu'on mesure, à un instant donné, la grandeur physique \mathcal{A} , l'état du système après la mesure est modifié.

5^{eme} postulat :

Si la mesure de la grandeur physique \mathcal{A} sur le système dans l'état $|\psi\rangle$ donne le résultat, l'état du système immédiatement après la mesure est la projection normée de $|\psi\rangle$ sur le sous espace propre ξ_n associé à a_n .

Soit :

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

Remarque :

Si $g_n = 1$, $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} = e^{i\theta}|u_n\rangle$ ce "ket" décrit le même état physique que $|u_n\rangle$.

6.2.4 Évolution des systèmes dans le temps**6^{ème} Postulat**

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

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

où $H(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système . $H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V$ est l'opérateur Hamiltonien du système.

6.2.5 Règles de quantification

Toute grandeur physique \mathcal{A} s'exprime en fonction des variables dynamiques fondamentales \vec{r} et \vec{p} . Les règles de quantification vont nous permettre de construire l'observable A à partir de l'expression de \mathcal{A} déjà définie en mécanique classique. Ainsi, pour obtenir l'observable A, il suffit de remplacer dans l'expression de $\mathcal{A}(\vec{r}, \vec{p}, t)$, la variable position $\vec{r}(x, y, z)$ par l'observable associée (X, Y, Z) et la variable impulsion $\vec{p}(p_x, p_y, p_z)$ de la particule par l'observable associée (P_x, P_y, P_z) .

Application :

Oscillateur harmonique à une dimension

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{kx^2}{2} \mapsto H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{kX^2}{2}$$

Particule dans un potentiel scalaire

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \mapsto H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r})$$

Supposons que dans $\mathcal{A}(\vec{r}, \vec{p}, t)$, apparaisse le terme de la forme $\vec{r} \cdot \vec{p}$

En Mécanique classique : $\vec{r} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{r}$

Mais en Mécanique quantique: $\vec{R} \cdot \vec{P} = \vec{P} \cdot \vec{R}$ de plus, ni $\vec{R} \cdot \vec{P}$, ni $\vec{P} \cdot \vec{R}$ ne sont hermétiques.

Pour cela, on ajoute une règle de symétrisation, qui permet de définir de façon unique le produit

$$\vec{r} \cdot \vec{p} \text{ . on a : } \vec{r} \cdot \vec{p} = \frac{\vec{r} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{r}}{2} \mapsto \frac{\vec{R} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \vec{R}}{2} \text{ qui est bien hermétique.}$$

Règle :

L'observable A qui décrit une grandeur physique \mathcal{A} définie classiquement s'obtient en remplaçant, dans l'expression convenablement symétrisée de \mathcal{A} , \vec{r} et \vec{p} par les observables \vec{R} et \vec{P} respectivement.

6.3 Interprétation du contenu physique des postulats

6.3.1 Interprétation probabiliste de ψ

Les observables (X, Y, Z) et (P_x, P_y, P_z) possèdent chacune un spectre continu. En effet, l'expérience montre que les variables \vec{r} et \vec{p} peuvent avoir toutes les valeurs possibles.

D'autre part, l'application du 4^{ième} postulat à ces observables permet de retrouver l'interprétation probabiliste de $\psi(\vec{r})$ et $\bar{\psi}(\vec{p})$

En effet : considérons une particule dans un état normé $|\psi\rangle$:

- ✓ La probabilité pour qu'une mesure de sa position donne un résultat compris entre \vec{r} et $\vec{r} + d\vec{r}$ vaut : $dP(\vec{r}) = |\langle \vec{r} | \psi \rangle|^2 d^3r = |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$
- ✓ La probabilité pour qu'une mesure de son impulsion donne un résultat compris entre \vec{p} et $\vec{p} + d\vec{p}$ vaut : $dP(\vec{p}) = |\langle \vec{p} | \psi \rangle|^2 d^3p = |\psi(\vec{p})|^2 d^3p$

6.3.2 Quantification de certaines grandeurs physiques

Le 3^{ième} postulat permet d'expliquer la quantification observée pour certaines grandeurs physiques, comme l'énergie. Mais, il n'implique pas que toutes les grandeurs sont quantifiées. D'ailleurs, l'expérience montre bien qu'il y a des observables à spectre continu.

6.3.3 Valeur moyenne d'une observable

La valeur moyenne d'une observable A , est définie comme la moyenne des résultats obtenus en effectuant un grand nombre N de mesures de A sur des systèmes, qui sont tous dans le même état $|\psi\rangle$. Elle est donnée par :

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (|\psi\rangle \text{ étant normé}).$$

Exemples :

$$\checkmark \quad \langle X \rangle_\psi = \langle \psi | X | \psi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) x \psi(\vec{r}) d^3r \quad \text{en représentation } \{|\vec{r}\rangle\}$$

$$\checkmark \quad \langle P_x \rangle_\psi = \langle \psi | P_x | \psi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) p_x \psi(\vec{r}) d^3p \quad \text{en représentation } \{|\vec{p}\rangle\}$$

$$\checkmark \quad \langle P_x \rangle_\psi = \langle \psi | P_x | \psi \rangle = \int \psi^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}) d^3r \quad \text{en représentation } \{|\vec{r}\rangle\}$$

6.3.4 Conservation de la norme

On considère un système dans l'état $|\psi\rangle$. On montre que $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0$. Ceci signifie que si $|\psi\rangle$ est normé à $t = 0$, il le sera au cours du temps.

6.3.5 Évolution de la valeur moyenne d'une observable

Soit un système dans l'état $|\psi\rangle$ normé et soit A une observable. On montre que :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad \text{où } H(t) \text{ est l'hamiltonien du système.}$$

Application : aux observables \vec{R} et \vec{P}

Considérons pour simplifier le cas d'une particule à 1 D, soumise à un potentiel scalaire et stationnaire $V(x)$.

$$\frac{d}{dt} \langle X \rangle_\psi = \frac{1}{m} \langle P_x \rangle_\psi$$

$$\frac{d}{dt} \langle P_x \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \langle [P_x, V(X)] \rangle = -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

Ces deux équations sont l'expression du théorème d'Ehrenfest. Elles ont une forme qui rappelle les équations de la M.C :

$$\frac{dx}{dt} = v = \frac{p}{m} \text{ et } \frac{dp}{dt} = m \frac{dv}{dt} = F \text{ (F dérive d'un potentiel).}$$

6.3.6 Constantes du mouvement

Par définition, on appelle constante du mouvement, une observable A qui ne dépend pas explicitement du temps et qui commute avec H :

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 0 \text{ et } [A, H] = 0$$

Ce qui donne $\frac{d}{dt} \langle A \rangle \psi = 0$, la valeur moyenne de A dans cet état n'évolue pas au cours du temps (d'où l'appellation de constante de mouvement).

Pour un système conservatif (H ne dépend pas explicitement du temps), donc H est une constante du mouvement.

Chapitre 7 Oscillateur harmonique linéaire à une dimension

7.1 L'oscillateur harmonique en mécanique classique

Classiquement, l'oscillateur harmonique linéaire est un point matériel de masse m , soumis à une force de rappel proportionnelle à la distance qui le sépare de l'origine, soit :

$$F = -k x \text{ où } k \text{ est une constante positive.}$$

L'équation du mouvement s'obtient en écrivant la PFD :

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad \text{avec } \omega = \frac{k}{m} \text{ est la pulsation}$$

La solution la plus générale s'écrit : $x = x_M \cos(\omega t - \varphi)$

Elle dépend de 2 constantes, x_M et φ qui sont déterminées par les conditions initiales du mouvement. La particule est donc animée d'un mouvement oscillatoire sinusoïdale autour du point 0, d'amplitude x_M et de pulsation ω

L'énergie potentielle en chaque point s'obtient par : $\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}}(V)$. Soit $V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

L'énergie totale est :

$$E = T + V(x) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

En reportant dans cette expression, la solution générale, on trouve: $E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_M^2$

E est donc indépendante du temps (c'est une propriété générale des systèmes conservatifs) et elle peut prendre n'importe quelles valeurs positives ou nulles, puisque x_M peut-être à priori quelconque.

7.2 L'oscillateur harmonique en mécanique quantique

En Mécanique Quantique, l'oscillateur harmonique est aussi un système simple dont on sait résoudre l'équation de Schrödinger. Son étude est d'une grande importance en théorie quantique car l'hamiltonien intervient dans tous les problèmes mettant en jeu des oscillations quantifiées telles que les vibrations moléculaires et cristallines.

On obtient aisément à partir de l'expression de l'énergie totale, l'opérateur hamiltonien du système en remplaçant les grandeurs x et p par les observables X et P_x :

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

Où X et P_x vérifient la relation de commutation $[X, P_x] = i\hbar$

H étant indépendant du temps (système conservatif), l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres : $H |\varphi_v^i\rangle = E_v |\varphi_v^i\rangle$, où $|\varphi_v^i\rangle$ et E_v sont respectivement les valeurs propres et les v propres de H . L'indice v peut à priori être discret ou continu.

L'équation aux valeurs propres s'écrit en représentation $\{|x\rangle\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \varphi_v^i(x) = E_v(x)$$

On dispose de deux méthodes pour étudier l'oscillateur en MQ :

- ✓ La méthode d'intégration (résolution de l'équation aux valeurs propres s'écrit en représentation $\{|x\rangle\}$).
- ✓ La méthode des opérateurs (résolution de l'équation: $H |\varphi_v^i\rangle = E_v |\varphi_v^i\rangle$).

Nous allons utiliser cette dernière.

7.2.1 Valeurs propres de H

Nous allons entreprendre l'étude de l'équation : $H |\varphi_v^i\rangle = E_v |\varphi_v^i\rangle$ et trouver le spectre de $H =$

$$\frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

Pour cela on introduit :

✓ Les observables sans dimensions \hat{X} et \hat{P} définies par :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \text{ et } \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} P_x$$

on vérifie que $[\hat{X}, \hat{P}] = i$

$$H = \hbar\omega\hat{H} \text{ avec } \hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$$

✓ Les opérateurs

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) \qquad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P})$$

Ces deux formules s'inversent facilement pour donner :

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+ + a) \qquad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} (a^+ - a)$$

$$\hat{H} \text{ se met sous la forme: } \hat{H} = a^+a + \frac{1}{2} = aa^+ - \frac{1}{2} \qquad \text{car } [a, a^+] = 1$$

✓ Introduisons $N = a^+a$:

N est hermétique.

$\hat{H} = N + \frac{1}{2}$; de sorte que les vecteurs propres de \hat{H} sont les vecteurs propres de N et vice versa.

Finalement l'opérateur H s'écrit : $H = \hbar\omega\hat{H} = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$

Posons : $N |\varphi_v^i\rangle = v |\varphi_v^i\rangle$

Lorsque cette équation sera résolue, nous saurons que le vecteur propre $|\varphi_v^i\rangle$ de N est aussi le vecteur propre de H avec la valeur propre $E_v = (v + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

7.2.1.1 Détermination du spectre de H

On montre que le spectre de l'opérateur N est constitué des entiers non négatifs.

On remplace par la suite ν par $n \geq 0$.

Ce qui permet de conclure que les valeurs propres de H sont de la forme :

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \text{avec} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

On peut montrer aussi que ces niveaux d'énergies ne sont pas dégénérés.

Donc, en mécanique quantique, l'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée et ne peut pas prendre n'importe quelle valeur.

Remarquons de plus que la valeur la plus faible possible (niveau fondamental) n'est pas nulle, mais vaut : $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$.

7.2.1.2 Interprétation des opérateurs a et a^+

Soit $|\varphi_n\rangle$ l'état propre de H associée à la valeur propre $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \Leftrightarrow H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$

On vérifie aisément que :

- ✓ $a|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de H associée à la valeur propre $E_n - \hbar\omega$
- ✓ $a^+|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de H associée à la valeur propre $E_n + \hbar\omega$

On dit pour cette raison que a est un opérateur d'annihilation et a^+ un opérateur de création : leur action sur un vecteur propre de H fait en effet disparaître ou au contraire apparaître un quantum d'énergie $\hbar\omega$.

7.2.2 États propres de H

L'état fondamental $|\varphi_0\rangle$ associé à $n = 0$ est défini par : $a|\varphi_0\rangle = 0$

On suppose par la suite que $|\varphi_0\rangle$ est normé ($\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$).

Le vecteur $|\varphi_1\rangle$ correspondant à $n = 1$ est proportionnel à $a^+|\varphi_0\rangle$:

$$|\varphi_1\rangle = c_1 a^+ |\varphi_0\rangle$$

Nous déterminons c_1 en imposant à $|\varphi_1\rangle$ d'être normé, ce qui donne $|c_1|^2 = 1$

(on prend $c_1 = 1$). D'où $|\varphi_1\rangle = a^+|\varphi_0\rangle$

On peut de même construire $|\varphi_2\rangle$ à partir de $|\varphi_1\rangle$: $|\varphi_2\rangle = c_2 a^+|\varphi_1\rangle$

En imposant à $|\varphi_2\rangle$ d'être normé, on trouve : $|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a^+|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (a^+)^2|\varphi_0\rangle$

Le procédé se généralise facilement. On trouve : $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n|\varphi_0\rangle$

L'action des opérateurs a et a^+ sur les vecteurs de la base $\{|\varphi_n\rangle\}$ (vecteurs propres de H et N) est : $a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$ et $a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$

On peut ainsi calculer facilement les éléments de matrice des opérateurs a , a^+ , X et P en représentation $\{|\varphi_n\rangle\}$.

$$\langle\varphi_{n'}|a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n} \langle\varphi_{n'}|\varphi_{n-1}\rangle = \sqrt{n} \delta_{n',n-1}$$

$$\langle\varphi_{n'}|a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} \langle\varphi_{n'}|\varphi_{n+1}\rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n',n+1}$$

7.2.3 Fonctions d'onde associées aux états stationnaires

Nous allons maintenant nous placer dans la représentation $\{|x\rangle\}$ et écrire les fonctions d'onde $\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle$ qui représentent alors les fonctions propres de H .

Déterminons tout d'abord la fonction $\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle$ qui représente l'état $|\varphi_0\rangle$, il suffit de projeter l'état $a|\varphi_0\rangle = 0$ sur $|x\rangle$.

On trouve : $\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$

Ainsi en partant de $\varphi_0(x)$ qui est connu explicitement, on peut déterminer pas à pas toutes les fonctions propres successives de H par l'action de l'opérateur a^+ sur $|\varphi_0\rangle$, ainsi on trouve :

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|(a^+)^n|\varphi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]^n \varphi_0(x)$$

7.3 Comparaison entre l'oscillateur classique et quantique

– En mécanique classique, l'énergie la plus basse de l'oscillateur harmonique est obtenue lorsque la particule est immobile ($p = 0$ et $T = 0$) à l'origine des abscisses ($x = 0$ et $V =$

0), donc $E = 0$. Il en va autrement en mécanique quantique : l'état d'énergie minimale est $|\varphi_0\rangle$ dont l'énergie est $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ n'est pas nulle. Cette différence essentielle entre les résultats quantique et classique peut être considérée comme ayant son origine dans les relations d'incertitudes, qui interdisent de minimiser simultanément énergie cinétique et énergie potentielle ($\Delta x \Delta p \approx \hbar$).

– On remarque que la fonction d'onde et donc la densité de probabilité correspondant au niveau fondamental ($n = 0$) est une Gaussienne. C'est-à-dire qu'il est "possible" en quantique, d'observer la particule en tout point de l'axe ox , puisque la fonction d'onde ne s'annule qu'à l'infini, alors qu'en cas classique la particule ne peut se déplacer que sur un segment de droite.

– On peut vérifier que pour les états d'énergies de plus en plus élevés c'est-à-dire pour des valeurs de n de plus en plus grandes, l'allure de la courbe de densité de probabilité quantique se rapproche de plus en plus de la courbe de probabilité classique (le temps de présence de la particule en chaque point) pour une même énergie. On retrouve alors le modèle de physique classique dans le modèle quantique pour les hautes énergies.

Eléments de la bibliographie

1. Mécanique quantique Tome I, Claude Cohen-Tannoudji ; Bernard Diu Hermann
2. Problèmes de physique commentés, tome II, Hubert Lombroso
3. Introduction à la mécanique quantique cours et applications de H. Bouchriha
4. Cours de mécanique quantique et travaux dirigés M. Zourkani, Université Sidi Mohamed Ben Abdellah, Fès
5. Cours de mécanique quantique de F. Benabicha, Université Moulay Ismail Meknes.
6. Cours de Physique : Pierre Morel Hermann, Problèmes corrigés de Physique avec rappels de cours MP2-PC2, Es-sbai ; A. Guessous ; N. Najid ; M. Ouazzani
7. Physique MP2-PC2 Caractère quantique de la matière, Janot et M. Gerl Hachette Université
8. Mécanique quantique, Jean-Luis Basdevant École polytechnique Ellipses