



Mécanique quantique

Physique quantique et statistique (Université Libre de Bruxelles)



Scanne pour ouvrir sur Studocu

PHYSIQUE GENERALE III

Mécanique quantique

Auteur Jacques WEYERS

Lecteur Fabio MALTONI

Notes du cours PHY 1222

Année académique 2006-2007

Université catholique de Louvain, Faculté des Sciences
Département de Physique

Chapitre I

Le monde microscopique

I Echelles et ordres de grandeur

Malgré son nom, un *atome* est une structure composite : il est constitué d'un *noyau* et d'*électrons*. L'ordre de grandeur de la dimension (linéaire) d'un atome est de quelques angströms ($1\text{\AA} = 10^{-8}\text{ cm}$).

Lorsqu'il est isolé, un atome est d'une stabilité remarquable : ni explosion, ni effondrement. Lorsque des atomes sont "excités" — par collisions ou sous l'effet d'une radiation extérieure — ils émettent des radiations *discrètes* caractéristiques de la substance considérée. L'ensemble des radiations émises par une substance donnée constitue le spectre de cette substance. La propriété essentielle d'un spectre atomique est son aspect *discret* : les longueurs d'ondes de la radiation émise prennent des valeurs précises séparées par des intervalles de longueurs d'ondes pour lesquelles il n'y a pas de radiation.

L'interaction fondamentale (i.e. la force) responsable de la structure des atomes et de leur spectre est l'*interaction électromagnétique*. Les énergies typiques qui entrent en jeu dans les phénomènes atomiques sont de l'ordre de l'électron-volt (eV).

$$1eV = 1.602 \times 10^{-19} \text{ joule} = 1.602 \times 10^{-12} \text{ erg}.$$

L'étude du *noyau* atomique est l'objet de la physique nucléaire. La dimension (linéaire) d'un noyau est de l'ordre du fermi ($1f = 10^{-13}\text{ cm}$) et le domaine d'énergie typique de la physique nucléaire (spectres nucléaires) est de l'ordre de quelques millions d'électronvolts ($1\text{Mev} = 10^6 eV$). Les constituants du noyau, protons et neutrons sont également des structures composites et l'exploration de la structure ultime de la matière n'est toujours pas achevée. Aujourd'hui, dans la physique des *quarks* et des *gluons* les dimensions spatiales explorées sont de l'ordre de 10^{-18} à 10^{-20} cm et les énergies mises en jeu sont de l'ordre de quelques TeV ($1TeV = 10^6\text{Mev} = 10^{12}eV$).

La “mécanique quantique” a été inventée (entre 1925 et 1930) pour les besoins de la cause c’est-à-dire pour comprendre et expliquer les *phénomènes* observés à l’échelle atomique : la stabilité des atomes et le caractère discret des spectres atomiques sont des phénomènes *radicalement en contradiction* avec les lois de la physique de Newton et de Maxwell. Le cadre conceptuel de la physique quantique est, à plus d’un titre, révolutionnaire et joue aujourd’hui encore un rôle essentiel dans notre compréhension de la structure de la matière.

II Structure corpusculaire (et électrique) de la matière

1. Les lois de l’électrolyse (M. Faraday)

Entre 1831 et 1834, M. Faraday réalise une série d’expériences décisives concernant la structure électrique de la matière. Dans ces expériences (electrolyse), il fait passer un courant entre deux électrodes suspendues dans diverses solutions et il mesure les quantités de gaz ou de solide libéré ou amassé à chaque électrode. Par exemple, dans l’électrolyse de l’eau, il récolte de l’oxygène gazeux à une électrode et un volume double d’hydrogène à l’autre. Il découvre, entre autres, que la quantité (masse du solide ou volume de gaz) du produit récolté à une électrode est proportionnelle à la quantité totale d’électricité qui est passée dans la solution. En comparant diverses solutions il découvre également que les masses de différents éléments libérés par electrolyse sont dans les mêmes proportions que celles dans lesquelles ces éléments se combinent dans les réactions chimiques. (Le terme moderne de cette mesure est l’équivalent gramme : 1 gr d’hydrogène se combine à 8 gr d’oxygène pour donner 9 grammes d’eau. L’équivalent gramme de l’oxygène est 8 grammes).

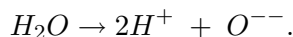
L’interprétation des résultats de Faraday se base sur la notion de transport de courant par des *ions* de charge électrique précise. Les expériences de Faraday ont permis, entre autres, de déterminer la quantité de charge électrique nécessaire pour libérer un équivalent gramme de n’importe quel élément chimique :

$$1 \text{ Faraday } (F) = 96,485 \text{ coulombs.}$$

En langage moderne, le Faraday est la quantité de charge électrique portée par un équivalent-gramme de toute espèce d’ion.

Une autre conséquence des expériences de Faraday est la réalisation que l’unité de base de toute substance chimique est la *molécule*. Rappelons au passage la notion de *mole*. Approximativement, une mole d’une substance pure donnée est la masse en gramme égale à son poids moléculaire (avec l’atome d’hydrogène pris pour unité). Ainsi une mole d’eau à une

masse de 18 g : 2 pour l'hydrogène et 16 pour l'oxygène. Par définition, il y a un même nombre N de molécules dans une mole de toute substance pure. Ce nombre N est appelé le nombre d'Avogadro. Pour le déterminer, il faut mesurer une propriété individuelle d'un atome ou d'une molécule, par exemple la charge d'un ion :



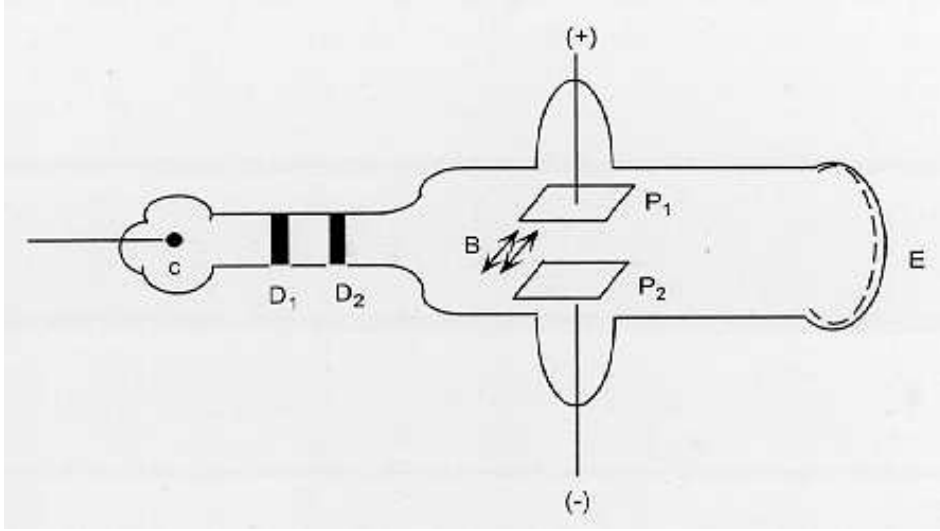
Cette relation signifie que dans l'électrolyse de l'eau, chaque ion d'hydrogène transporte une "unité atomique de charge électrique" tandis que chaque ion d'oxygène en transporte deux (négatives). Puisqu'un Faraday d'électricité libère un équivalent gramme d'oxygène, il "suffit" de mesurer l'unité atomique de charge électrique pour déterminer le nombre d'Avogadro ...

2. La découverte de l'électron (J.J. Thompson)

La découverte de l'électron par J.J. Thompson en 1897 est un évènement d'une importance capitale dans l'histoire de la physique microscopique : il s'agit, en fait, de la découverte de la première "particule élémentaire" !

Plusieurs années d'études expérimentales de "décharges électriques dans les gaz" avaient établi l'existence de "rayons cathodiques" émis par une électrode mise à un potentiel hautement négatif dans un tube à vide. Le résultat des expériences de Thompson peut se résumer comme suit : les rayons cathodiques sont constitués d'*électrons*, particules de masse m et de charge e bien précises — Thompson n'en mesure que le rapport $\frac{e}{m}$ — et les électrons sont des éléments constitutifs de toutes les substances chimiques, c'est-à-dire, en fin de compte des éléments constitutifs de l'atome.

Le dispositif expérimental de Thompson est partiellement esquissé ci-dessous :



les “rayons cathodiques” issus de C passent à travers les collimateurs D_1 et D_2 puis entre deux plaques métalliques chargées P_1 et P_2 pour aboutir finalement sur un écran fluorescent E à l’extrémité du tube à vide. Un électroaimant (non dessiné) permet de créer un champ magnétique B , parallèle aux plaques P_1 et P_2 et perpendiculaire au faisceau de rayons cathodiques.

En jouant sur les champs (électrique et magnétique), les forces électriques et magnétiques qui s’exercent sur les particules du “rayon cathodique” peuvent se balancer. Si ces particules ont une masse m , une charge e et une vitesse v , nous avons

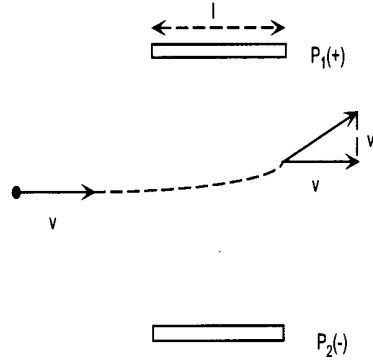
$$F_{\text{électrique}} = eE \quad (1.1)$$

$$F_{\text{magnétique}} = \frac{e}{c}vB \quad (1.2)$$

Lorsque ces forces se compensent le faisceau cathodique passe à travers la région comprise entre P_1 et P_2 sans être défléchi et, dans ce cas

$$F_{\text{électrique}} = F_{\text{magnétique}} \Rightarrow \frac{v}{c} = \frac{E}{B} \quad (1.3)$$

Si on éteint maintenant le champ magnétique, le faisceau cathodique va être défléchi d’un angle θ



Dans le cas considéré, il y a une accélération (transverse) $\frac{eE}{m}$ durant le temps $\frac{\ell}{v}$ que les particules cathodiques mettent à franchir la longueur des plaques. Elles vont donc acquérir une vitesse (transverse)

$$v_t = \frac{eE\ell}{mv} \quad (1.4)$$

et l'angle de déflexion θ est donné par

$$\tan \theta = \frac{v_t}{v} = \frac{eE\ell}{mv^2} \quad (1.5)$$

et, en substituant v donné par l'éq. (??), nous obtenons

$$\frac{e}{m} = \frac{v^2 \tan \theta}{E\ell} = \frac{c^2 E}{\ell B^2} \tan \theta. \quad (1.6)$$

La valeur (actuelle) de ce rapport est donnée par

$$\frac{e}{m} = 5.2728 \times 10^{17} \text{ esu/g} = 1.7588 \times 10^{11} \text{ Coulomb/kg}.$$

Des expériences ultérieures (en particulier celle des "gouttes d'huile" de Millikan) ont permis de mesurer e avec le résultat

$$e = 4.80324 \times 10^{-10} \text{ esu} = 1.6022 \times 10^{-19} \text{ Coulomb}$$

et dès lors

$$m = 9.109 \times 10^{-28} \text{ g}$$

A partir de la définition d'un Faraday et sous des hypothèses raisonnables, nous obtenons donc pour le nombre d'Avogadro

$$N = \frac{F(\text{araday})}{e} = 6.022 \times 10^{23}.$$

3. Les raies spectrales

Les raies spectrales, c'est-à-dire l'ensemble des longueurs d'ondes du rayonnement émis par un atome sont caractéristiques de cet atome. Après la découverte de l'électron, il devenait plausible de relier le spectre d'un atome à des "modifications du mouvement des électrons"! Pour plausible qu'elle soit, cette idée est radicalement incompatible avec les lois de la physique classique (mécanique de Newton et électromagnétisme de Maxwell) ! Nous y reviendrons.

Historiquement, J.J. Balmer "découvre" en 1885 que le spectre visible de l'hydrogène

Raie	Couleur	$\lambda(\text{\AA})$
H_α	rouge	6563
H_β	turquoise	4861
H_γ	bleu	4341
H_δ	violet	4102
H_ϵ	ultraviolet	3970

est remarquablement bien reproduit par la formule

$$\lambda_n = 3646 \frac{n^2}{n^2 - 4} \text{\AA} (n = 3, 4, 5 \dots). \quad (1.7)$$

Le succès de cette formule demande bien entendu une explication. Un pas important (Rydberg et Ritz) fut de réaliser que le paramètre important dans la description des spectres atomiques est la fréquence $\nu = \frac{c}{\lambda}$. La formule de Balmer peut évidemment se réécrire sous la forme

$$\frac{1}{\lambda_n} = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4 \dots \quad (1.8)$$

avec R_H , la constante de Rydberg, égale (pour l'hydrogène) à $109,700 \text{ cm}^{-1}$. $\frac{1}{\lambda_n}$ est donc la différence de deux termes, $\frac{R_H}{4}$ et $\frac{R_H}{n^2}$. Pour interpréter cette formule (Bohr), nous devons d'abord introduire le concept de photon.

III Structure corpusculaire de la lumière : le photon (γ)

1. La formule d'Einstein

En 1905, Einstein propose une explication révolutionnaire de l'effet photo-électrique (voir plus bas) : il suggère que le rayonnement électromagnétique a, en fait, une structure *corpusculaire*. Einstein postule que les “particules de lumière” i.e. les photons ont une énergie donnée par

$$\begin{aligned} E_\gamma &= h\nu = \left(\frac{h}{2\pi}\right)(2\pi\nu) = \hbar\omega \\ &= h\frac{c}{\lambda} \end{aligned} \quad (1.9)$$

où h est la constante de Planck.

$$\begin{aligned} h &= 6.626210^{-27} \text{ erg.sec} = 6.626210^{-34} \text{ joule.sec} \\ &= 4.13610^{-15} \text{ eV.sec} \\ \hbar = \frac{h}{2\pi} &= 6.58210^{-22} \text{ MeV.sec} \\ hc &= 12,400 \text{ eV.}\text{\AA} \end{aligned}$$

La constante de Planck est une des constantes fondamentales de la physique et elle est omniprésente en physique quantique comme nous le verrons. Cette constante fut introduite par Planck en 1900 dans son étude du spectre de rayonnement d'objets incandescents.

Numériquement la formule d'Einstein peut s'écrire comme

$$E_\gamma(\text{en eV}) = \frac{12,400}{\lambda(\text{en } \text{\AA})} \quad (1.10)$$

La lumière visible (4 à 7000 \AA) correspond donc à des photons d'énergie 1.8 à 3 eV. Remarquons que le nerf optique de l'être humain réagit à quelques (4 ou 5) photons dans le jaune (raie du sodium). Avec une sensibilité un peu plus fine, la lumière nous apparaîtrait comme une “pluie” de photons !

Les photons sont des *particules* de masse nulle. Dès lors

$$E_\gamma = p_\gamma c \quad (\text{cinématique relativiste}) \quad (1.11)$$

$$\text{et} \quad \lambda = \frac{h}{p_\gamma} \quad (1.12)$$

Réconcilier la notion de photon (*particule* de masse nulle) avec celle d'onde électromagnétique (expérience de Young, diffraction, ondes radio etc ...) n'est pas trivial. Dans le contexte

de la physique quantique, une “onde” électromagnétique de fréquence ν est un effet collectif, cohérent, d’un gigantesque nombre de *photons* d’énergie $E_\gamma = h\nu$ et d’impulsion $p_\gamma = \frac{h}{\lambda}$.

On ne saurait surestimer l’importance de la formule d’Einstein : c’est une des étapes clés du développement de la physique quantique. En 1913, Bohr utilise cette formule pour “expliquer” le spectre de Balmer-Rydberg à partir de sa théorie de l’atome (atome de Bohr) et prédire d’autres raies spectrales : il écrit

$$E_\gamma = h\nu = E_{n_2} - E_{n_1} = hcR_H \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (n_2 > n_1). \quad (1.13)$$

Le spectre de Balmer comprend les raies pour lesquelles $n_1 = 2$. Entretemps, Pashen avait observé, dans l’infrarouge, les raies correspondant à $n_1 = 3$; en 1914, Lyman cherche et trouve (dans l’ultraviolet) la série de raies pour $n = 1$.

Pour écrire la formule (1.13), Bohr postule que les niveaux d’énergie d’un électron lié à un noyau sont discrets et avec une intuition physique remarquable il argumente que ces niveaux d’énergie sont donnés par la formule $E_n = -\frac{hcR_H}{n^2}$. Les succès de la formule de Bohr ne doivent pas occulter le fait que “l’atome de Bohr” est incompatible avec les concepts de la physique classique.

2. Evidences expérimentales

L’effet photoélectrique

Lorsqu’une surface métallique est soumise à un bombardement par de la lumière, il arrive que des électrons soient émis par le métal. Cette éjection d’électrons sous l’effet de la lumière est l’effet photoélectrique. Les aspects les plus remarquables du phénomène sont les suivants :

- pour une valeur donnée de λ ou ν de la lumière incidente, le spectre d’énergie des électrons émis varie de pratiquement zéro à une énergie cinétique maximale (K_{\max}) très nettement définie et qui varie linéairement avec la fréquence ν . K_{\max} ne dépend pas de l’intensité du faisceau lumineux mais uniquement de sa fréquence
- au dessous d’un seuil de fréquence donné et qui dépend du métal utilisé comme émetteur d’électrons, il n’y a plus d’électrons éjectés et ce, quelle que soit l’intensité du faisceau lumineux.

Dans le contexte de l’électromagnétisme classique, ces résultats sont inexplicables ! En effet, les électrons du métal peuvent très bien être éjectés du métal par suite de leur agitation

causée par le champ électrique de l'onde lumineuse, mais alors l'énergie cinétique maximale de ces électrons devrait croître avec l'intensité du faisceau lumineux !

L'explication du phénomène par Einstein est limpide : le processus de base dans l'effet photoélectrique est l'absorption par un électron d'un photon d'énergie $E_\gamma = h\nu$. L'électron va perdre une partie de l'énergie ainsi gagnée en circulant dans le métal tandis que les électrons situés près de la surface pourront s'échapper avec une énergie cinétique maximale. Sans entrer dans le détail du processus, les électrons qui s'échappent du métal doivent franchir une "barrière de potentiel" (qui confine les électrons dans le métal) et par conséquent les électrons qui n'ont pas d'énergie suffisante pour franchir cette barrière de potentiel W ne pourront quitter le métal. Ceci explique simplement l'existence d'une fréquence de seuil $\nu_0 = \frac{W}{h}$. Dans le modèle d'Einstein, l'énergie cinétique maximale des photo-électrons est donnée par

$$K_{\max} = h\nu - W = h(\nu - \nu_0). \quad (1.14)$$

Ceci est en parfait accord avec les résultats expérimentaux. Remarquons en particulier que la pente de la droite (1.14) est donnée par la constante de Planck quel que soit le métal utilisé.

Eclairer la surface du métal avec une lumière plus intense augmente simplement le nombre de photons d'énergie donnée et implique donc une augmentation du nombre d'électrons éjectés du métal mais cela n'a aucun effet sur le spectre d'énergie des électrons émis.

Un autre aspect de l'effet photoélectrique est le délai temporel entre l'instant où le faisceau lumineux est allumé et le début de la mesure d'un courant photoélectrique. En 1928, E.O. Lawrence et J.W. Beams montrent que des photoélectrons sont quelquefois émis moins de $3 \cdot 10^{-9}$ sec après le début du bombardement lumineux et ceci avec un faisceau lumineux tellement faible que le délai temporel dans une description ondulatoire classique serait de plusieurs heures !

L'effet Compton

Dans une série d'expériences effectuées entre 1919 et 1923, A.H. Compton montre que lorsque des photons (rayons-X) entrent en collision avec des électrons libres, ils perdent de l'énergie (i.e. leur longueur d'ondes augmente). Cette perte est précisément celle que l'on peut calculer pour un processus de diffusion élastique ($\gamma + e^- \rightarrow \gamma + e^-$) entre deux particules dont l'une (le photon) a une impulsion et une énergie donnée par $p_\gamma = \frac{E_\gamma}{c} = \frac{h\nu}{c}$.

$$\pi^0 \rightarrow 2\gamma$$

Les exemples de processus nucléaires ou de physique des particules élémentaires où la nature corpusculaire du rayonnement électromagnétique est mise en évidence sont légion. Un bel exemple en est la désintégration de la particule élémentaire π^0 dont l'énergie au repos est d'environ 135 Mev en exactement deux photons !

Exercice : cinématique de $\pi^0 \rightarrow 2\gamma$.

Chapitre II

Les principes de la mécanique quantique

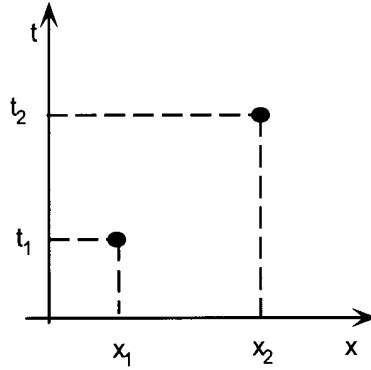
Puisque la physique classique est totalement inadéquate pour décrire les phénomènes observés à l'échelle atomique, il est nécessaire d'élaborer *un nouveau cadre conceptuel* de la physique. Cette nouvelle théorie de l'univers physique est conventionnellement appelée la "mécanique quantique". Dans ses grandes lignes elle a été conçue entre 1925 et 1930 et elle est l'oeuvre, principalement, de N. Bohr, W. Heisenberg, E. Schrödinger et P.A.M. Dirac.

La mécanique quantique est une révolution scientifique majeure qui modifie radicalement un certain nombre de concepts de base de la physique. Inventée pour les "besoins de la cause" c'est-à-dire pour expliquer les faits expérimentaux à l'échelle atomique, la mécanique quantique a été maintes fois testée et ses prédictions sont expérimentalement vérifiées à un niveau de précision absolument extraordinaire et ce jusqu'aux échelles actuellement atteintes dans l'exploration de la structure de la matière à savoir $10^{-19} - 10^{-20}$ cm !

I Enoncé des principes

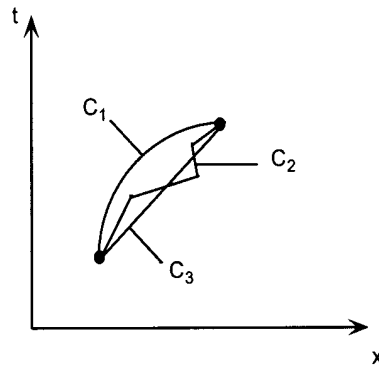
Le but de ce chapitre est d'énoncer le plus clairement possible les principes de base de la mécanique quantique. Ces principes sont extrêmement simples mais relativement abstraits et surprenants à plus d'un titre.

Pour la facilité de l'exposé, considérons le cas d'une particule non relativiste de masse m qui, au cours du temps (t) se meut dans un espace unidimensionnel (x). Plus précisément, considérons la situation où cette particule se trouve au point x_1 à l'instant t_1 et au point x_2 à l'instant t_2



A priori, il y a une multitude de *chemins* possibles pour aller de (x_1, t_1) à (x_2, t_2) . Par “chemin”, nous entendons une courbe quelconque $x_c(t)$ qui part du point x_1 à l’instant t_1 et aboutit au point x_2 à l’instant t_2 i.e.

$$x_c(t_1) = x_1 \quad x_c(t_2) = x_2$$



Un des concepts de base de la mécanique classique est celui de *trajectoire*. Par définition, la trajectoire $x_T(t)$ d’une particule classique est le chemin particulier (unique) que cette particule va effectivement parcourir pour aller de (x_1, t_1) à (x_2, t_2) . Cette trajectoire est déterminée par le *principe de moindre action*. Pour une particule non relativiste dans un potentiel $V(x)$, l’action S est définie par

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \frac{m(\dot{x}(t))^2}{2} - V(x(t)) \right\}.$$

Cette action S est une fonctionnelle du chemin $x_c(t)$ i.e.

$$S \equiv S(x_c(t)) = \int_{t_1}^{t_2} dt \left\{ \frac{m(\dot{x}_c(t))^2}{2} - V(x_c(t)) \right\}.$$

(Si on se donne un chemin $x_c(t)$, on peut calculer le nombre correspondant $S(x_c(t))$). Le principe de moindre action est l’assertion que

$$S(x_T(t)) < S(x_c(t)) \quad (\text{pour tout } x_c(t) \neq x_T(t))$$

c'est-à-dire que la trajectoire $x_T(t)$ est le chemin pour lequel l'action est la plus petite possible. [voir figure ci-dessous].

Remarques

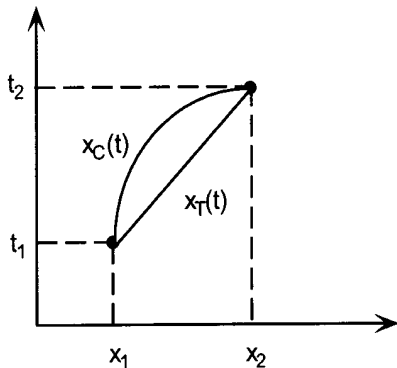
- 1) L'action est une grandeur dimensionnelle $[S] = [ML^2T^{-1}]$. Elle est définie pour tous les chemins $x_c(t)$, mais, en fin de compte, seul $S(x_T(t))$ est "physiquement relevant".
- 2) Pour déterminer concrètement $x_T(t)$, on ne calcule évidemment pas $S(x_c(t))$ pour tous les chemins possibles (ce serait un peu long !).

Le "calcul des variations" permet de passer du principe de moindre action à l'équation d'Euler-Lagrange

$$\delta S = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \frac{\partial L}{\partial x} \quad \text{soit encore, dans le cas considéré,} \quad m\ddot{x}(t) = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

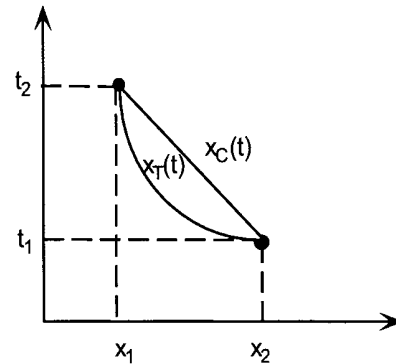
et $x_T(t)$ est la solution unique de cette équation différentielle avec $x_T(t_1) = x_1$ et $x_T(t_2) = x_2$.

Par exemple pour une particule libre



$$S(x_T) < S(x_c)$$

ou pour une particule dans un potentiel linéaire $V = -mgx$



$$S(x_T) < S(x_c)$$

Après ce rappel des "règles du jeu" de la mécanique classique, nous pouvons à présent énoncer celles de la mécanique quantique.

1.1 Assertion préliminaire

La mécanique quantique est une théorie *intrinsèquement probabiliste*

Il ne sera plus question de trajectoire entre les points (x_1, t_1) et (x_2, t_2) mais bien de la probabilité de trouver la particule au point x_2 à l'instant t_2 sachant qu'à l'instant t_1 elle se trouvait au point x_1 .

Commentaires

- 1) La notion de probabilité est la même qu'en physique classique (p.ex. jet de dés).
- 2) Dire que la théorie quantique est probabiliste implique qu'une même expérience effectuée dans les mêmes conditions peut donner des résultats différents !
- 3) "Intrinsèquement probabiliste" veut dire que l'indéterminisme ou le manque de certitude inhérent à une théorie probabiliste ne vient pas de la difficulté ou de l'impossibilité pratique de déterminer les conditions initiales précises du problème (p.ex. jet de dés) mais que cet indéterminisme est pour ainsi dire une loi de la nature. En d'autres mots : c'est comme cela !

Si le monde quantique est effectivement "comme cela" (intrinsèquement probabiliste), il est inéluctable que la notion de *trajectoire précise* perde son sens. Nous reviendrons sur ce commentaire ultérieurement.

- 4) Si on abandonne la notion de trajectoire précise, peut-on encore parler, par exemple, d'une particule qui arrive au point x_2 à l'instant t_2 ? La réponse est oui. Une manière "pratique" d'illustrer cette réponse est de placer un détecteur au point x_2 . A l'instant t_2 où ce détecteur se déclenche, il n'y a pas de doute ni de probabilité mais la certitude que la particule est au point x_2 .

1.2 Structure conceptuelle et règles du jeu de la mécanique quantique

Si la notion de probabilité est la même en mécanique quantique qu'en physique classique, le calcul de cette probabilité est radicalement différent. En mécanique quantique, le concept de base est celui d'*amplitude de probabilité*. Nous noterons

$$A(x_2, t_2; x_1, t_1) \quad (2.1)$$

l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point x_2 à l'instant t_2 sachant qu'elle était au point x_1 à l'instant t_1 . L'amplitude de probabilité est un nombre complexe et la probabilité correspondante est donnée par le module au carré de ce nombre complexe. Les règles du jeu sont les suivantes :

- (I) Pour un chemin donné, $x_c(t)$, l'amplitude de probabilité $A_c(x_2, t_2; x_1, t_1)$ est donnée par

$$A_c(x_2, t_2; x_1, t_1) = \exp i \frac{S[x_c(t)]}{\hbar} \quad (2.1)$$

où $S(x_c(t))$ est la valeur de l'action pour le chemin $x_c(t)$ et \hbar est la constante de Planck divisée par 2π .

(II) Principe de superposition linéaire

$$\begin{aligned} A(x_2, t_2; x_1, t_1) &= \sum_c A_c(x_2, t_2; x_1, t_1) \\ &= \sum_c e^{iS(x_c(t))/\hbar} \end{aligned} \quad (2.2)$$

où \sum_c est la "somme" sur tous les chemins allant de x_1 à x_2 .

(III) La probabilité (relative) de trouver la particule au point (x_2, t_2) sachant qu'elle était au point (x_1, t_1) est donnée par

$$P(x_2, t_2; x_1, t_1) = |A(x_2, t_2; x_1, t_1)|^2 \quad (2.3)$$

Par probabilité relative on entend une probabilité non-normalisée. Par exemple si l'évènement A est 5 fois plus probable que l'évènement B on peut dire que la probabilité relative de A est 5 et celle de B est 1.

Précisons quelque peu la règle (2.3) en ajoutant que la probabilité de trouver la particule au point x_2 ou au point x_3 , à l'instant t_2 est donnée par

$$P(x_2 \text{ ou } x_3, t_2; x_1, t_1) = P(x_2, t_2; x_1, t_1) + P(x_3, t_2; x_1, t_1) \quad (2.4)$$

Quelques remarques encore, avant d'illustrer concrètement ces règles :

(1) La probabilité (relative) de parcourir un chemin donné C est donnée par

$$P_C = |A_C(x_2, t_2; x_1, t_1)|^2 = 1.$$

Elle est indépendante du chemin et par conséquent *tous les chemins sont équiprobables*, ce qui est encore une manière d'exprimer le fait que la notion de trajectoire n'a plus vraiment de sens en mécanique quantique.

Par ailleurs, l'action est *omniprésente* en mécanique quantique. C'est la raison pour laquelle \hbar apparaît dans toutes les formules ou expressions quantiques. Dans le cas qui nous concerne ici l'action est une fonctionnelle du chemin parcouru, $S(x_c(t))$ est un nombre qui dépend de la fonction $x_c(t)$. Mais tandis qu'en mécanique classique seule $S(x_T(t))$, à savoir la valeur spécifique de l'action pour la trajectoire, a un contenu physique, en mécanique quantique *toutes les valeurs* $S(x_c(t))$ pour tous les chemins possibles sont *significatives* : elles déterminent *les phases des amplitudes de probabilité* $A_c(x_2, t_2; x_1, t_1)$.

- (2) La règle (II) est absolument fondamentale dans toute la physique quantique. Elle affirme que lorsqu'il y a plusieurs alternatives pour un processus physique, l'amplitude de probabilité du processus est la somme des amplitudes de chacune des alternatives. Ceci est radicalement différent de la règle (2.4) où on additionne les probabilités pour des processus distincts !

Pour préciser les règles — quand faut-il additionner les amplitudes et quand additionne-t-on les probabilités — il est nécessaire de distinguer deux types d'alternatives et cette distinction est liée aux deux significations de la conjonction “ou” :

- * La première signification implique une notion d'exclusion et les alternatives correspondantes sont appelées *alternatives exclusives*.

Exemples :

- sémantique : ici ou là-bas
- physique quantique : particule *détectée* au point x_2 ou au point x_3 à un instant donné.

Pour des alternatives exclusives, ce sont les probabilités qu'on additionne. Ceci est la règle habituelle du calcul des probabilités, par exemple : la probabilité d'obtenir un “as” ou un “six” dans un jet de dés est $\frac{1}{3}$.

- * La deuxième signification de la conjonction ou implique une notion de combinaison ou d'interférence et les alternatives correspondantes sont appelées *alternatives interférentes*. Pour des alternatives interférentes ce sont les amplitudes qu'on additionne et non plus les probabilités.

Exemples :

- sémantique : avant le lever du soleil ou après son coucher, il fait nuit.
- physique quantique : dans le processus physique *complètement défini* par

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{particule au point } x_1 \text{ à l'instant } t_1 \\ \text{et particule au point } x_2 \text{ à l'instant } t_2 \end{array} \right\}$$
 les différents chemins pour aller de x_1 à x_2 sont des alternatives interférentes. Nous avons ajouté la restriction “processus physique complètement défini par ... ” en anticipant un fait capital de la physique quantique à savoir *le rôle de “l'observation”*. Nous y reviendrons dans le paragraphe suivant.

- (3) Dans la règle (II) nous utilisons l'expression “somme sur tous les chemins allant de x_1 à x_2 ”. Cette “somme” correspond à la notion mathématique “d'intégrale fonctionnelle”. Nous n'utiliserons pas cet outil mathématique dans la suite de ce cours, mais

intuitivement, on peut définir cette “somme” comme suit :

divisons l'intervalle de temps $t_1 - t_2$ en N intervalles égaux, ε ,

$$t_2 - t_1 = N\varepsilon$$

tout chemin de x_1 à x_2 peut alors être approximé par les positions

$$\begin{array}{ll} x_1 & \text{au temps } t_1 \\ y_1 & \text{au temps } t_1 + \varepsilon \\ y_2 & \text{au temps } t_1 + 2\varepsilon \\ \vdots & \\ y_{N-1} & \text{au temps } t_1 + (N-1)\varepsilon \end{array}$$

$$\text{et enfin } x_2 \quad \text{au temps } t_2 = t_1 + N\varepsilon.$$

La “somme sur tous les chemins” est alors approximée par une intégrale multiple (ordinaire) sur les variables y_1, \dots, y_{N-1} . Il ne reste plus qu'à passer à la limite $\varepsilon \rightarrow 0, N \rightarrow \infty, \varepsilon N = t_2 - t_1 \dots$

- (4) A partir des règles (I) et (II), il n'est pas difficile de dériver une règle importante pour la composition d'amplitudes correspondant à des processus qui se succèdent dans le temps. Pour alléger la notation convenons de noter par $a \equiv (x_a, t_a) \quad b \equiv (x_b, t_b) \quad d \equiv (x_d, t_d)$. Alors

$$A(b, a) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_d A(b, d) A(d, a) \quad (2.5)$$

c'est-à-dire que l'amplitude de probabilité pour aller de a à b est la somme (intégrale) sur toutes les positions x_d (à un temps t_d) du produit de l'amplitude pour aller de a à d et de l'amplitude pour aller de d à b .

Pour dériver cette formule notons tout d'abord qu'un chemin donné C qui va de x_a à x_b en passant par x_d définit un chemin donné C_1 qui va de x_a à x_d et un chemin donné C_2 qui va de x_d à x_b . Comme $S_C(b, a) = S_{C_2}(b, d) + S_{C_1}(d, a)$, nous avons

$$A_C(b, a) = A_{C_2}(b, d) A_{C_1}(d, a)$$

et comme “ $\sum_C = \int dx_d \sum_{C_2} \sum_{C_1}$ ” la formule (2.5) est démontrée.

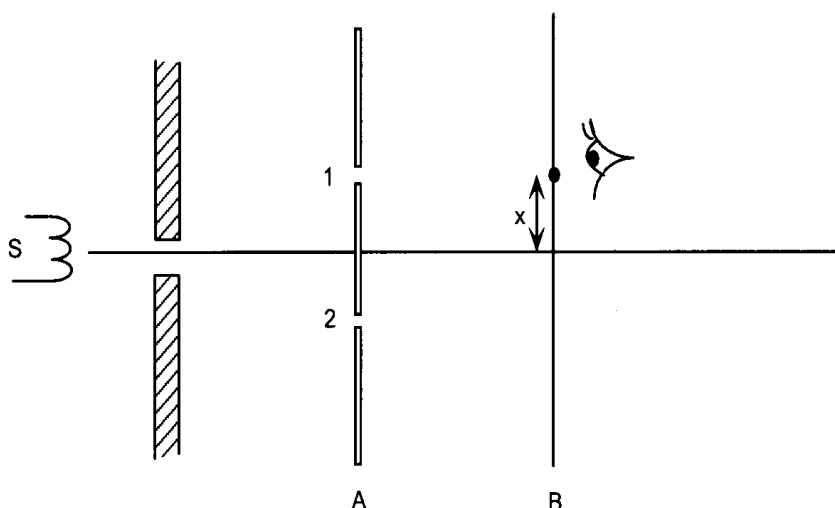
“ $\sum_C = \int dx_d \sum_{C_2} \sum_{C_1}$ ” signifie qu'on peut sommer sur tous les chemins C de x_a et x_b en sommant d'abord sur tous les chemins C_1 qui vont de x_a à un point intermédiaire x_d et sur tous les chemins C_2 qui vont du même point intermédiaire x_d à x_b et enfin sur toutes les valeurs de x_d

II L'expérience à deux trous

Remarque préliminaire : l'expérience que nous allons décrire a effectivement été faite¹. Comme notre but, à ce stade de l'exposé, est d'illustrer les règles du jeu de la physique quantique nous avons considérablement idéalisé la situation expérimentale et l'analyse théorique reste très qualitative.

2.1 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental est schématisé ci-dessous



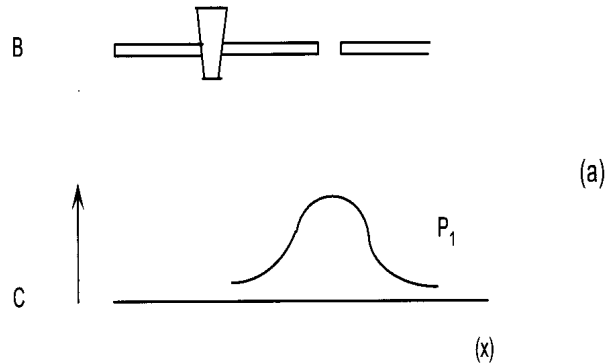
En A nous avons un faisceau collimaté d'électrons provenant d'une source S . L'écran B est percé de deux trous (1 et 2) et les électrons arrivent finalement sur l'écran C qui est "couvert" de détecteurs (compteurs Geiger). Ce qui est mesuré est le nombre d'électrons arrivant à la distance x de la ligne du faisceau et ceci pour diverses valeurs de x . L'expérience nous donne donc directement la probabilité (relative) pour des électrons issus du collimateur A d'arriver au point x de l'écran C .

2.2 Résumé des principaux résultats

1. Les électrons sont bien des particules (de masse et de charge bien déterminées) : en jouant sur l'intensité de la source S on peut faire arriver les électrons "un à un" en un seul des détecteurs de l'écran C .

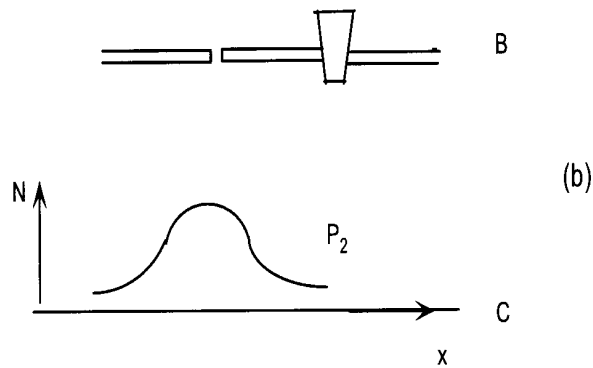
¹C. Jonsson, Z. Phys. 161 (1961) 454.

2. Lorsque le trou 2 est fermé, la courbe de distribution des électrons est esquissée ci-dessous (nous avons “renversé” les écrans B et C pour la facilité).

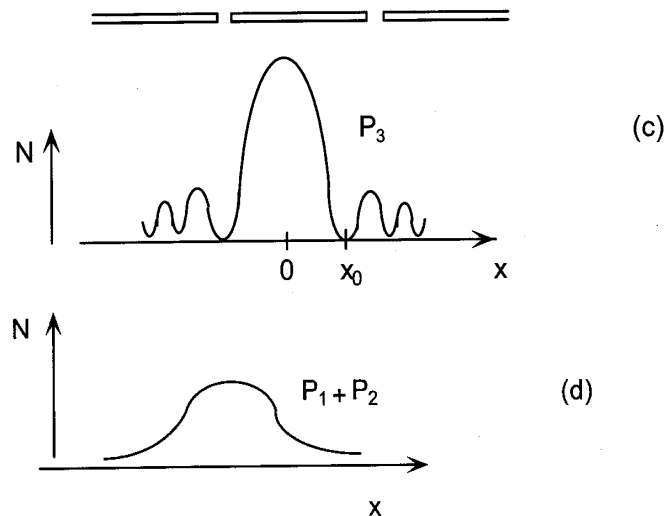


La courbe P_1 est obtenue par lissage du nombre N d'électrons enregistrés dans les compteurs Geiger situés à la distance x de la ligne du faisceau (0).

3. Lorsque c'est le trou 1 qui est fermé, la distribution est donnée par une courbe symétrique à savoir

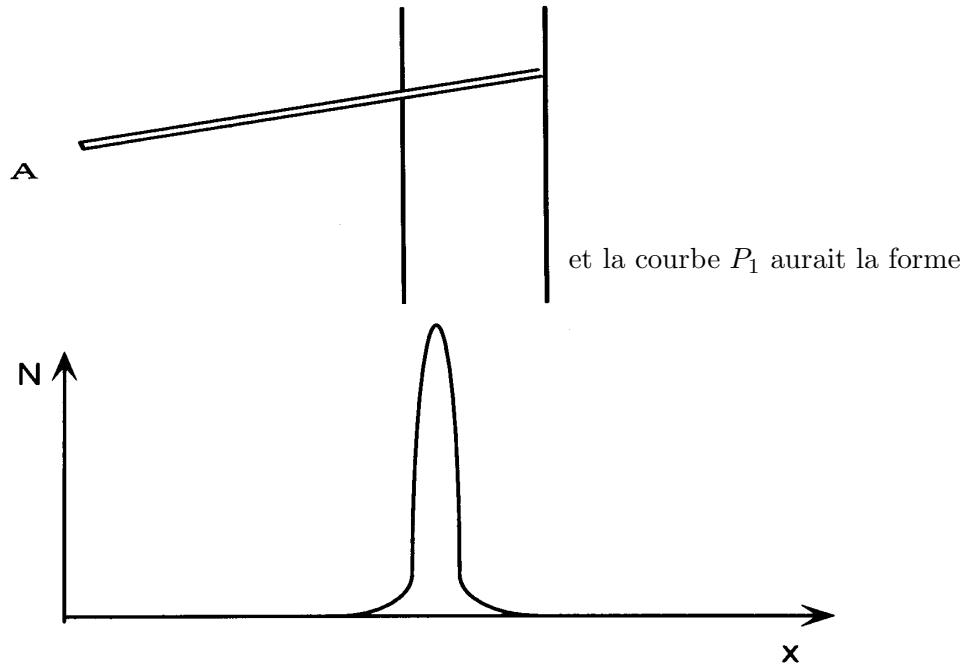


4. Lorsque les deux trous sont ouverts



Les résultats de cette expérience sont étonnants et classiquement inexplicables !!

La courbe P_1 (ou P_2) est une courbe obtenue en comptant le nombre d'électrons qui arrivent dans un détecteur de l'écran C . Les électrons arrivent un à un sur cet écran mais à des endroits très distants les uns des autres. Pour un faisceau de particules classiques :



et cette forme est *incompatible* avec le résultat observé.

Le fait expérimental $P_3 \neq P_1 + P_2$ est encore plus surprenant. De plus, en $x = 0$ par exemple $P_3 > P_1 + P_2$ tandis qu'en $x = x_0$ $P_3 < P_1 + P_2$: il y a donc moins d'électrons qui arrivent en $x = x_0$ lorsque les deux trous sont ouverts que lorsqu'un seul de ceux-ci l'est !?

2.3 Illustration qualitative des règles de la physique quantique dans l'expérience à 2 trous

En vertu de la formule (2.5), pour aller du collimateur A au point x sur l'écran C il n'y a que deux amplitudes de probabilité à considérer, soit :

- $A_1(x)$ = (ampl. pour aller de A au trou 1) \times (amplitude pour aller de 1 au point x);
- $A_2(x)$ = (ampl. pour aller de A au trou 2) \times (amplitude pour aller de 2 au point x)

Lorsque le trou 2 est fermé, l'électron qui arrive en x doit être passé par le trou 1 et donc

$$P_1(x) = |A_1(x)|^2.$$

De même

$$P_2(x) = |A_2(x)|^2.$$

Par contre lorsque les deux trous sont ouverts

$$P_3(x) = |A_1(x) + A_2(x)|^2 \neq P_1(x) + P_2(x).$$

Enfin, il n'est pas difficile d'imaginer des situations pour lesquelles $P_3 > P_1 + P_2$ ou $P_3 < P_1 + P_2$.

Ainsi pour $x = 0$, la symétrie du problème suggère que $A_1(0) = A_2(0)$ et dès lors

$$P_3(0) = |A_1(0) + A_2(0)|^2 = 4P_1(0) > P_1(0) + P_2(0) = 2P_1(0).$$

De même en $x = x_0$, si $A_2(x_0) = e^{i\pi} A_1(x_0) = -A_1(x_0)$. Nous aurons bien

$$P_3(x_0) = 0 \quad !$$

Le point essentiel de cette analyse qualitative est que l'expérience à 2 trous, *dans les conditions précises où elle a été définie* (à savoir faisceau d'électrons en A et enregistrement des données en C), est une confirmation expérimentale de l'assertion que le passage de l'électron par le trou 1 et le passage de l'électron par le trou 2 sont des *alternatives interférentes*. Mais nous pouvons maintenant pousser un peu plus loin notre analyse de la signification physique de cette assertion en essayant de déterminer *expérimentalement* par quel trou (1 ou 2) l'électron passe ...

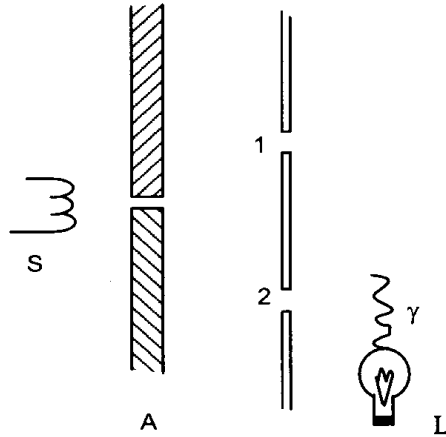
III Modification du dispositif expérimental : effet de l'observation

Commençons par préciser que par le mot "observation" nous entendons l'ensemble du dispositif expérimental qui définit les conditions dans lesquelles une expérience est effectuée.

$P_3(x) \neq P_1(x) + P_2(x)$ est un *fait expérimental* incontournable. Logiquement nous devons en conclure que lorsque les deux trous sont ouverts il n'est tout simplement pas vrai que l'électron passe par un trou ou (exclusif) par l'autre !!

Il n'est pas difficile d'imaginer une expérience qui teste directement cette conclusion étonnante.

Nous pouvons, par exemple, installer une source lumineuse L derrière l'écran B .



La lumière est composée de photons et comme nous l'avons vu au chapitre précédent (effet Compton) il y a diffusion des photons par les électrons, c'est-à-dire des collisions élastiques $\gamma + e^- \rightarrow \gamma + e^-$. En principe, il est possible de déterminer si la diffusion d'un photon se fait derrière le trou 1 ou le trou 2 et donc de déterminer par quel trou un électron est passé.

Remarque : pour illustrer aussi simplement que possible des points conceptuels importants, nous idéalisons considérablement la situation expérimentale. Nous verrons ultérieurement que les conclusions que nous tirons de cette "expérience idéalisée" sont universellement confirmées par toutes les expériences bien réelles cette fois qui ont été effectuées sur des systèmes quantiques !

Le résultat de notre "expérience idéalisée" avec installation de la source lumineuse L est de montrer sans la moindre équivoque possible que l'électron passe en effet par le trou 1 ou (exclusif) par le trou 2 !! En d'autres mots, pour chaque électron qui arrive éventuellement à l'écran C il y a diffusion de lumière derrière le trou 1 ou derrière le trou 2 et, pourvu que la source S soit suffisamment faible (c'est-à-dire que les électrons arrivent un à un) il n'y a jamais diffusion de lumière derrière les 2 trous à la fois ! Pour le dire autrement, la *charge électrique complète de l'électron* passe toujours par le trou 1 ou par le trou 2 et jamais par "fraction" à travers les 2 trous !

Nous semblons plongés en plein paradoxe !

En effet, achevons notre expérience idéalisée, c'est-à-dire nous détectons par quel trou l'électron passe (grâce à la source L) et nous mesurons la distribution d'arrivée des électrons sur l'écran C . Le résultat de l'expérience est que la distribution des électrons qui arrivent à l'écran C est donnée par la courbe (d) de la page 20, c'est-à-dire par $P_1 + P_2$! Ouf !! la logique est sauve. Dans l'expérience idéalisée nous pouvons en effet étiqueter *chacun* des électrons qui arrive sur l'écran C : celui-ci est passé par le trou 1 puisqu'il y a eu diffusion Compton

derrière ce trou-là, tel autre électron est passé par le trou 2 ... etc. Par cet étiquetage, nous séparons les électrons en deux classes disjointes : ceux qui sont arrivés en C en passant par le trou 1 et ceux qui sont arrivés en C en passant par le trou 2.

Expérimentalement, on observe que les électrons de la première classe (ceux qui sont passés par le trou 1) ont une distribution donnée par P_1 , tandis que ceux de la seconde classe (passés par le trou 2) ont une distribution donnée par P_2 . Manifestement en combinant ces distributions le résultat global ne peut être que la courbe (d) et effectivement c'est bien ce qu'on observe. Remarquons au passage que la distribution des électrons dont on a déterminé qu'ils passent par le trou 1 est donné par P_1 que le trou 2 soit ouvert ou non. (Le trou 2 n'exerce aucune influence sur le mouvement des électrons qui passent par le trou 1).

Mais revenons à l'essentiel : *observer par quel trou l'électron passe modifie radicalement la distribution d'arrivée des électrons sur l'écran C* . (Je rappelle que par "observer" j'entends "utiliser un dispositif expérimental qui permette de déterminer").

Passer de la distribution P_3 (expérience à deux trous) à la distribution $P_1 + P_2$ (expérience idéalisée : 2 trous + source de lumière L) n'est pas un "petit" effet. En mots : *l'observation, en physique quantique, a comme effet de modifier radicalement le phénomène observé.*

Avant de commenter davantage les conséquences de cette assertion, revenons à notre expérience idéalisée et imaginons qu'on diminue l'intensité de la source lumineuse L derrière l'écran B (l'idée étant qu'une source lumineuse suffisamment faible ne devrait pas causer de modification "violente" dans la distribution d'arrivée en C). Mais la lumière est constituée de photons. Une lumière plus faible veut dire moins de photons et moins de photons signifie qu'on va "rater" des électrons, mais chaque fois qu'on "verra" un électron, la modification de sa probabilité d'arrivée en C sera tout aussi radicale.

Plus précisément un photon est une particule d'énergie $E = h\nu$ et de quantité de mouvement $p = \frac{h}{\lambda}$. Par conséquent dans une lumière plus faible il y aura moins de photons diffusés, mais pour chaque électron qui diffuse un photon l'effet sera toujours aussi dramatique. Dès lors, pour les électrons que l'on rate dans une lumière plus faible la distribution sera toujours donnée par la courbe P_3 tandis que pour les électrons qui diffusent des photons et que l'on détecte donc comme passant par le trou 1 ou (exclusif) par le trou 2 la distribution sera $P_1 + P_2$. Le résultat final sera une moyenne pondérée des courbes (c) i.e. P_3 et (d) i.e. $P_1 + P_2$. Dans une lumière forte, aucun électron n'est raté et la distribution est $P_1 + P_2$ tandis que dans une lumière très faible presque tous les électrons seront ratés et la distribution sera pratiquement donnée par P_3 .

On peut pousser l'analyse un peu plus loin : puisque la modification de la distribution des électrons est liée à la quantité de mouvement des photons, ne peut-on diminuer celle-ci? Dans le langage de l'optique géométrique, diminuer la quantité de mouvement des photons revient à prendre une source lumineuse L dont la longueur d'ondes est de plus en plus grande et on ne peut localiser un objet qu'au moyen d'une onde lumineuse dont la longueur d'ondes est nettement plus petite que la taille de l'objet en question. Par cet argument dès que la longueur d'ondes est plus grande que la séparation des 2 trous on ne pourra plus détecter si l'électron est passé par le trou 1 ou par le trou 2. Dans un langage "photonique" il faut que la quantité de mouvement du photon reste suffisamment grande pour qu'il y ait diffusion et qualitativement il y a une limite au-delà de laquelle la diffusion ne sera plus "mesurable"!

La boucle est bouclée et nous pouvons à présent tirer les conclusions :

- (1) Il n'y a pas de paradoxe dans la distribution d'arrivée des électrons sur l'écran C :
 - si le point de passage (trou 1 ou trou 2) n'est pas déterminé (i.e. mesuré), la distribution est donnée par P_3 ;
 - si le point de passage est déterminé, la distribution est donnée par $P_1 + P_2$.
- (2) Toute observation menant à la détermination du point de passage de l'électron doit donc perturber la probabilité de distribution en C de manière radicale (c'est-à-dire suffisamment que pour passer de P_3 à $P_1 + P_2$).

Le côté inéluctable de la seconde conclusion est exprimé par le principe d'incertitude de Heisenberg auquel nous consacrons le paragraphe suivant.

IV Le principe d'incertitude de Heisenberg

C'est Heisenberg qui, le premier, a remarqué que la cohérence interne de la mécanique quantique implique une "*limitation intrinsèque*" sur ce qui est "possible" (théoriquement ou expérimentalement) dans le cadre de cette mécanique. Cette limitation intrinsèque est exprimée par son *principe d'incertitude*. Dans le cas de l'expérience à 2 trous, le principe d'incertitude affirme qu'"il est impossible de déterminer le point de passage de l'électron à travers l'écran B (trou 1 ou trou 2) sans nécessairement passer de la distribution P_3 à la distribution $P_1 + P_2$ ". Une autre manière d'exprimer le même principe est la suivante : "toute tentative expérimentale de détermination du point de passage de l'électron à travers l'écran B sans perturber la distribution P_3 est vouée à l'échec" !

Il est évident, dans la présentation que nous en donnons, que la cohérence logique de la mécanique quantique exige que le principe d'incertitude soit universel, c'est-à-dire d'application pour toute méthode physique qui pourrait être utilisée pour la détermination du point de passage de l'électron.

Plus généralement, nous pouvons énoncer le principe d'incertitude comme suit :

“Il est impossible de rendre exclusive une alternative interférente sans détruire l'interférence”.

Heisenberg n'a évidemment pas énoncé son principe d'incertitude sous cette forme ! Nous verrons ultérieurement comment passer de l'expression générale du principe d'incertitude à la forme plus “opérationnelle” donnée par Heisenberg à savoir : $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar$.

V Mécanique quantique et mécanique classique

La règle (II) du § 1.2, à savoir

$$A(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_c A_c(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sum_c \exp \frac{i S_c(x_c(t))}{\hbar}$$

encode ce qu'il y a sans doute de plus caractéristique dans la physique quantique. D'une part tous les chemins sont *équiprobables* et, d'autre part, les différents chemins sont des *alternatives interférentes*. L'amplitude de probabilité totale se construit par *superposition linéaire* des amplitudes correspondant à chaque chemin particulier.

Par contre, en physique classique tous les chemins sont *interdits* sauf un, à savoir la trajectoire.

Mais tout système physique est en fin de compte composé d'atomes, d'électrons etc ... pour lesquels ce sont les lois et règles de la physique quantique qui sont d'application. Comment un système composé d'objets quantiques peut-il obéir aux lois de la physique classique ?

Nous esquissons un argument qualitatif qui indique que pour un système dont les dimensions (i.e. longueurs), masses et temps sont tels que S est colossalement grand en unités \hbar , les lois classiques s'obtiennent comme approximation ou plutôt comme limite des règles quantiques.

En d'autres mots

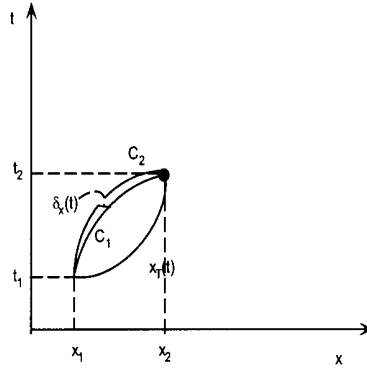
$$S \gg \hbar \Rightarrow \text{“approximation classique” est valable}$$

pour rappel $\hbar = 0(10^{-27} \text{ erg sec})$.

Cette conclusion est similaire à celle que l'on tire de la relativité restreinte d'Einstein (1905!!).

$$v \ll c \Rightarrow \text{approximation classique est valable.}$$

Voici l'argument. On a un système pour lequel S/\hbar est énorme (p.ex. la lune). Considérons un chemin particulier donné C_1 , pour ce système et voyons ce qui se passe lorsqu'on modifie ce chemin par un $\delta x(t)$ petit à l'échelle du système (p.ex dans le cas de la lune $\delta x(t) = 0$ (1 cm)!!).



$S_{C_2} = S_{C_1} + \delta S$ et δS est du premier ordre en δx , petit à l'échelle du système mais toujours énorme en unités \hbar . Dès lors en sommant sur l'ensemble des chemins proches (à l'échelle du système) de C_1 on obtiendra une amplitude de probabilité nulle (somme sur des phases $e^{i\delta S/\hbar}$ qui oscillent extrêmement rapidement !). Dans le calcul de l'amplitude de probabilité totale nous pouvons donc laisser tomber tous les chemins C_1 dont les voisins ont une action $S_{C_1} + \delta S$ avec δS du premier ordre en δx . Il ne reste que la trajectoire classique $x_T(t)$. L'action étant *extrême* pour cette trajectoire, une variation $\delta x_T(t)$ ne modifiera pas l'action $S_T(x_T(t))$ du moins au 1er ordre. Tous les chemins voisins de la trajectoire ont tous une amplitude de probabilité de *même phase* (à l'ordre considéré) et la somme sera donc non nulle. Qualitativement, l'amplitude de probabilité est donc nulle pour les ensembles de chemins d'un même voisinage sauf pour la trajectoire classique.

Grosso modo dans la limite $\frac{S}{\hbar} \rightarrow \infty$ l'amplitude de probabilité est 1 pour la trajectoire classique et 0 pour tout autre chemin : les interférences propres à la physique quantique disparaissent et on retrouve les lois classiques.

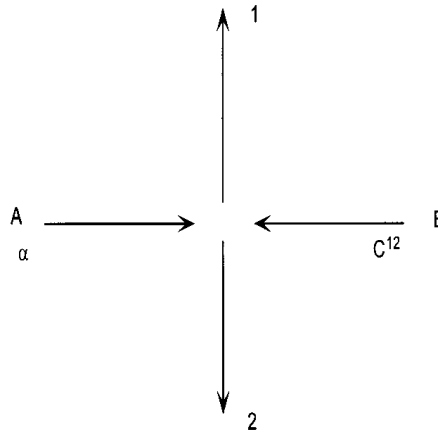
Il faut quand même remarquer que les chemins pour lesquels l'action ne diffère de $S_T(x_T(t))$ que d'une quantité de l'ordre de grandeur de \hbar sont également importants. A cet ordre de précision, il reste un "flou" dans la notion de trajectoire classique. En pratique cela n'a évidemment aucune importance.

VI Particules identiques

L'expérience à 2 trous est un superbe exemple des règles de la mécanique quantique et de la notion d'alternative interférente ou exclusive suivant l'observation qui est faite.

Dans ce paragraphe, nous esquissons un exemple d'une situation où les alternatives sont toujours interférentes c'est-à-dire où aucune observation (i.e. dispositif expérimental) ne peut les rendre exclusives. Qui plus est, suivant les règles de la mécanique quantique, il ne sera jamais possible de rendre ces alternatives exclusives (Il s'agit effectivement d'une *loi de la nature*).

Considérons la diffusion à 90° , dans le repère du centre de masse, de deux noyaux et prenons, par exemple $\alpha \equiv H^4e$ et C^{12} .



Nous écrivons l'amplitude de probabilité pour cet évènement sous la forme $A_{\alpha, C^{12}}(1, 2)$ dans le cas précis où la particule α est détectée en 1 et le C^{12} en 2. La probabilité de cette diffusion à 90° est donc donnée par

$$p = |A_{\alpha, C^{12}}(1, 2)|^2.$$

Supposons un moment que nous ne soyons pas intéressés par la nature du noyau qui arrive dans le détecteur 1, i.e. peu nous importe que ce soit α ou C^{12} . Si c'est α , l'amplitude est $A_{\alpha, C^{12}}(1, 2)$ tandis que si c'est C^{12} , l'amplitude est notée $A_{\alpha, C^{12}}(2, 1)$... Mais par suite de la symétrie du problème (diffusion à 90°)

$$A_{\alpha, C^{12}}(2, 1) = A_{\alpha, C^{12}}(1, 2).$$

La probabilité d'un évènement où un des noyaux arrive en 1 et l'autre en 2 est manifestement donnée par

$$|A_{\alpha, C^{12}}(1, 2)|^2 + |A_{\alpha, C^{12}}(2, 1)|^2 = 2p_1.$$

Nous additionnons les probabilités puisque les deux alternatives $\{\alpha$ arrive en 1 et C^{12} en 2 $\}$ ou $\{\alpha$ arrive en 2 et C^{12} en 1 $\}$ sont exclusives : même si le résultat ne nous intéresse pas, nous pouvons toujours, du moins en principe distinguer ces alternatives sans interrompre le processus de diffusion de quelque manière que ce soit.

Mais que va-t-il se passer si nous remplaçons le C^{12} par des particules α i.e. nous mesurons la diffusion $\alpha + \alpha \rightarrow \alpha + \alpha$ à 90° . Les particules α étant identiques, il n'y a plus moyen de distinguer si la particule α arrivant dans le détecteur 1 vient de A ou de B . Les amplitudes correspondantes sont nécessairement interférentes et la probabilité de cet événement est donc

$$|A_{\alpha\alpha}(1, 2) + A_{\alpha\alpha}(2, 1)|^2 = 4p_2. \quad (2.6)$$

Ce résultat spectaculaire est vérifié expérimentalement.

Pour des électrons ou des protons (à savoir des “particules de spin 1/2 entier”), le résultat est radicalement différent, mais comme nous n'avons pas encore introduit la notion de spin, nous devons remettre la discussion à plus tard. (En fait, dans le même état de spin on aura $A_{ee}(1, 2) = -A_{ee}(2, 1)$ et la probabilité de l'évènement sera donc 0. C'est une illustration du “principe de Pauli”!).

Pour des particules α ou des noyaux C^{12} etc ... (dont le spin est nul) le résultat (2.6) implique que dans le cadre de la mécanique quantique, le concept de particules identiques est *absolu*. Si les deux particules α , par exemple, n'étaient pas rigoureusement identiques, il y aurait moyen, demain ou dans 100 ans de distinguer le cas où c'est la particule “venant de A ” qui arrive au détecteur 1 du cas où c'est la particule venant de B et le résultat expérimental serait $2p_2$ au lieu de $4p_2$.

Bien que notre argument soit incomplet, la conclusion est universellement vraie : tous les protons de l'univers sont rigoureusement identiques, il en va de même pour les électrons, les photons, etc ... et les interférences inhérentes à cette identité sont parmi les succès les plus remarquables de la mécanique quantique (la table de Mendeleev, le laser, ...).

VII L'équation de Schrödinger

Le problème qui nous reste à résoudre est de développer une méthode pratique pour calculer explicitement une amplitude de probabilité. Dans l'énoncé des règles de la mécanique quantique, nous avons esquissé la notion “d'intégrale de chemin”. Nous pourrions maintenant préciser cette technique mathématique et faire de l'intégrale de chemin un outil *pratique* de calcul d'amplitudes. Cette manière de procéder exigerait des “développements formels” qui

dépassent largement les objectifs de ce cours. Heureusement il y a une solution plus simple à notre problème : plutôt que de développer des techniques de calcul “global” d’une amplitude, il est beaucoup plus facile de déterminer comment cette amplitude doit se comporter “localement”. Plutôt que de calculer des “intégrales de chemin”, nous allons résoudre une équation différentielle. Rappelez-vous qu’en mécanique classique le principe de moindre action donne une caractérisation globale de la trajectoire entre 2 points, mais, en fait, pour calculer cette trajectoire on résout les équations d’Euler-Lagrange. Ces équations encodent localement les conditions auxquelles la trajectoire doit satisfaire pour que “globalement” celle corresponde au minimum de l’action.

Commençons par définir une amplitude $\Psi(x, t)$ que nous appellerons l’*amplitude de Schrödinger*. (Hélas, l’usage veut que $\Psi(x, t)$ soit appelé une “fonction d’ondes” mais nous éviterons cette expression !!).

$\Psi(x, t)$ est l’amplitude de probabilité de trouver la particule au point x à l’instant t . La probabilité de l’évènement “la particule se trouve dans un intervalle dx autour du point x , au temps t , est donc donnée par

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx.$$

Le changement de notation

$$A(x, t; x_1, t_1) \leftrightarrow \Psi(x, t)$$

se justifie par le fait que l’information supplémentaire contenue dans la notation $A(x, t; x_1, t_1)$, à savoir que la particule était à un point x_1 à un instant (antérieur) t_1 , ne sera tout simplement pas utilisée.

La règle de multiplication des amplitudes pour des évènements successifs (Eq. (2.5)) s’écrit maintenant

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dy A(x, t; y, t') \Psi(y, t'). \quad (2.7)$$

Ceci est une “équation intégrale” pour la fonction d’ondes. La signification physique de cette équation est tout à fait limpide : l’amplitude d’être au point (x, t) est la somme (i.e. intégrale) sur tous les points y du produit de l’amplitude d’être en ce point, à un instant t' ($\Psi(y, t')$) par l’amplitude d’aller de (y, t') en (x, t) ($A(x, t; y, t')$) ($t > t'$).

Transformer cette équation intégrale en une équation différentielle ne présente pas trop de difficultés (mais c’est quand même loin d’être trivial !). Les détails sont donnés dans l’Appendice 1.

Pour une particule *non relativiste de masse m dans un potentiel $V(x)$* , on obtient finalement

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x,t)$$

C'est l'équation de *Schrödinger*. Cette équation est absolument fondamentale dans toute description des phénomènes quantiques non relativistes. Elle ne nous quittera plus!

VIII Résumé et commentaires

- *En physique quantique, on calcule la probabilité d'un processus physique.*
- *Cette probabilité est donnée par le module au carré d'une amplitude de probabilité.*
- *Dans le cas particulier d'une particule non relativiste l'amplitude de probabilité satisfait l'équation de Schrödinger.*
- *Dans le cas d'alternatives interférentes, on additionne les amplitudes tandis que pour des alternatives exclusives ce sont les probabilités que l'on somme.*

Commentaires

- (1) Il n'est pas difficile de généraliser tous les raisonnements qui précèdent au cas d'une particule qui se meut dans un espace à 3 dimensions. En particulier l'équation de Schrödinger deviendra alors

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

où Δ est le laplacien. En coordonnées cartésiennes

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

- (2) Les principes généraux de la physique quantique ont une validité qui va bien au-delà de celle de l'équation de Schrödinger. Ainsi la mécanique quantique est valable pour les *photons* (particules de lumière de masse nulle et en mouvement perpétuel à la vitesse c dans tous les repères inertiels). Il n'y a pas d'équation de Schrödinger pour calculer les amplitudes de processus physiques avec des photons ! Plus généralement en mécanique quantique relativiste, il n'est plus question d'équation de Schrödinger mais le concept d'amplitude reste tout à fait valable. Signalons, pour exciter un peu votre curiosité, que la rencontre entre mécanique quantique et relativité restreinte a été conceptuellement explosive : mécanique quantique + relativité implique l'existence de l'antimatière !

Dans le contexte de la physique "élémentaire", c'est-à-dire de la structure ultime de la matière et des interactions entre ces "constituants fondamentaux" (quarks, leptons, etc ...) la mécanique quantique est testée avec une précision incroyable. Pour vous donner une idée de cette précision, le moment magnétique μ de l'électron est aujourd'hui mesuré et calculé avec

$$\mu_{\text{mesuré}} = (1.001159652193 \pm 0.000000000010) \frac{e\hbar}{2m_e}$$

et $\mu_{\text{calculé}} = (1.001159652175) \frac{e\hbar}{2m_e}$ avec une "erreur théorique" plus grande que l'erreur expérimentale!

La précision de cette comparaison "théorie quantique" \leftrightarrow expérience est de plusieurs ordres de grandeur supérieure à la précision avec laquelle les lois de Newton, par exemple, ont jamais été confrontées à l'expérience !!

- (3) Dans l'énoncé des principes de la physique quantique nous avons insisté sur le fait que "in fine" les processus physiques sont une affaire de *particules*. Nous avons évité les expressions "ondes de matière", "propriétés ondulatoires de la matière" etc ... Ces expressions sont malheureusement d'un usage courant et se retrouvent dans pratiquement tous les livres ou articles consacrés à la physique quantique. Dans l'appendice 2 nous discutons de la signification de ces expressions qui sont la source de bien des confusions. En fait, il est plus simple et plus logique de ne pas utiliser de telles expressions !

Appendice 0

Quelques considérations zygomatiko-philosophiques

Pénétrer dans l'univers de la physique quantique n'est pas facile. Dans ce chapitre j'ai essayé d'énoncer le plus clairement possible les principes de base de cette physique. Ces principes sont simples mais, nonobstant mes qualités pédagogiques évidentes, je ne doute pas que cet énoncé soulève pas mal de questions. Qu'est-ce que tout cela veut dire ? Amplitude de probabilité ? Alternative interférente ? C'est de la physique ça ou c'est de la philosophie ? Eh oui, la vie d'un jeune futur physicien est dure, dure ... Pour adoucir quelque peu vos tourments je voudrais terminer l'exposé des principes de la physique quantique par une espèce d'analogie de la "carte du tendre" de l'amour courtois. Je vous rappelle que cette carte indiquait au chevalier soupirant le chemin à suivre (p.ex. le "pont des soupirs") et les pièges à éviter (p.ex. le "lac de l'indifférence") pour conquérir le coeur de sa belle. Cette "carte de l'étudiant suant pour comprendre la mécanique quantique" est malheureusement moins romantique ...

* Une première difficulté dans l'apprentissage de la physique quantique vient d'une *confusion dans le langage*.

Vous avez probablement tous entendu ou lu des expressions ou phrases du style "comportement ondulatoire de la matière ...", "dualité ondes-particules" ... , "le principe d'incertitude met une limite à la précision expérimentale ..." ou pire encore le "principe d'incertitude montre les limites de la science ..." Ha, ha, ha ! Ce n'est évidemment pas du tout de cela qu'il s'agit !! Le moment magnétique de l'électron, par exemple, est mesuré avec une précision phénoménale et le principe d'incertitude ne met aucune limite à cette précision. Quant aux "limites de la science" ... soyons sérieux ! Classiquement la position et la quantité de mouvement d'une particule sont, en principe, connaissables (théoriquement ou expérimentalement) avec une précision infinie ... c'est à ce préjugé épistémologique que les relations d'incertitude mettent une limite.

Je reviendrai sur ondes et particules dans l'appendice 2, mais je le répète encore une fois : un électron, par exemple, est une particule en tout lieu, en tout temps et en toute

circonstance, l'électron n'est pas une onde, n'est pas accompagné d'une onde ... etc.

1ère règle de l'étudiant(e) de physique quantique : pas de charabia !

* Une difficulté plus sérieuse vient du caractère “abstrait” de l'énoncé des principes tel que je l'ai donné ici (soit dit au passage, ce n'est pas moi qui ai inventé cet énoncé : je l'ai copié de Feynman).

Pourquoi parler d'amplitude de probabilité et pas de ce que l'électron fait “concrètement” ? C'est bien le noeud du problème : en physique quantique on ne dit pas ce que l'électron fait concrètement !! On calcule la probabilité que quelque chose se passe et puis c'est tout. Pour ne pas se casser la figure logiquement on est bien obligé de postuler ou d'admettre un monde physique “intrinsèquement probabiliste”. C'est en accord avec tous les faits expérimentaux et personne n'a encore trouvé le moyen de faire autrement. Je vais essayer d'être clair à ce sujet.

Tout d'abord il y a de la probabilité en physique quantique. C'est un fait et il n'y a pas d'états d'âme à avoir à ce sujet : l'expérience à 1 trou on peut la répéter dix mille fois et 10 000 fois l'électron va arriver à un point différent de l'écran C . Amen.

La théorie quantique prétend être une théorie complète et alors il n'y a pas le choix : l'aspect probabiliste doit être intrinsèque et une “description concrète” n'est plus possible.

Logiquement il y a une alternative à cette conclusion. Dans le jargon technique cela s'appelle des “variables cachées” et la démarche conceptuelle est la suivante : la probabilité en physique quantique c'est comme la probabilité de gagner au Lotto ! Elle vient du fait qu'on ne connaît pas un certain nombre de facteurs (les “variables cachées”); si on les connaissait on gagnerait toujours au Lotto. Pour le dire autrement, la physique quantique n'est pas la fin de l'histoire ... Cette autre vision des choses est parfaitement logique, mais personne n'est encore parvenu à proposer des variables cachées qui tiennent la route c'est-à-dire qui ne soient pas en contradiction avec l'un ou l'autre principe fondamental de la physique (en particulier avec le principe de relativité). Le caractère intrinsèquement probabiliste de la physique quantique ne contredit aucun principe ! C'est une idée révolutionnaire et elle n'est certainement pas intuitive. Si cette idée est correcte et je répète qu'il n'y a aucun fait expérimental pour la mettre en doute, alors adieu la “description concrète des phénomènes” et on est bien obligé de parler “abstrait” !

2ème règle de l'étudiant(e) en mécanique quantique : on ne joue pas au Lotto !

* Une autre difficulté concerne le “rôle de l’observation”. Je rappelle qu’il n’y a rien de subjectif dans la notion d’observation (on ne fait pas de psychologie ici, ouf !). Un dispositif expérimental “perturbe” un système quantique. Dans le cas de l’expérience à deux trous, l’observation détermine par quel trou l’électron est passé (ça c’est vrai) et on en conclut quelquefois que si on n’observe pas l’électron il ... passe par les deux trous à la fois (ça, c’est absurde).

Einstein était tellement allergique à cette “importance de l’observation” qu’on lui prête la réflexion suivante, faite à Max Born par un soir de printemps au clair de lune (enfin un peu de romantisme !) : “Max, croyez-vous vraiment que la lune n’est pas là quand personne ne la regarde” ?

Le rôle de l’observation est effectivement beaucoup plus “perturbant” en mécanique quantique qu’en mécanique classique. Pour comprendre de quoi il s’agit, il faut d’abord être prudent dans les assertions que l’on fait sur le monde physique. Dans l’accélérateur LEP du CERN, par exemple, un faisceau d’électrons et un faisceau de positrons se propagent à plus de 290 000 km/s et ces faisceaux sont, bien entendu, “contrôlés” en continu. La “perturbation du système causée par l’observation” n’empêche nullement la stabilité de ces faisceaux pendant des heures et des heures. Dans l’expérience à deux trous, la mécanique quantique ne dit pas que l’électron passe par les deux trous si on ne l’observe pas (l’électron n’est pas une onde !!). Subtilement la mécanique quantique dit seulement ceci : voyez-vous, il y a une amplitude de probabilité pour qu’il passe par l’un ou par l’autre trou. Si on n’observe pas l’électron, eh bien, vous additionnez les amplitudes ... etc ... !

Une manière d’exprimer les choses, due à Bohr, est de se dire qu’un “phénomène quantique doit être considéré dans son entièreté”. Bohr voulait dire par là que le phénomène “l’électron passe à travers l’écran percé de deux trous et est observé en C ” et le phénomène “l’électron passe à travers deux trous percés dans un écran, on mesure par quel trou il passe et il est observé en C ” sont deux phénomènes quantiques *différents*. C’est effectivement assez subtil !!!

Intuitivement l’amplitude de probabilité d’un processus donné est pour ainsi dire en construction permanente (par addition des amplitudes de chaque alternative). Une mesure détruit cette construction en excluant certaines alternatives ou, encore, une mesure force un ajustement de l’amplitude parce que ce qui était possible ne l’est plus. Si, malgré la règle 2, vous jouez quand même au Lotto, vous savez comment ajuster la probabilité de gain après le tirage de une, deux, ou plusieurs boules. En physique quantique, ce n’est pas la probabilité qu’on ajuste, mais l’amplitude !

3ème règle de l'étudiant(e) en mécanique quantique : quand on regarde l'un(e), on exclut l'autre !

* La difficulté de base de la mécanique quantique est liée à l'idée plus ou moins intuitive que l'on a de la *réalité physique* et des rapports entre celle-ci et la théorie ou l'expérience ! Aie, aie ! le terrain devient très glissant ... La lune est-elle ou n'est-elle pas là quand personne ne la regarde ? La réponse ne fait aucun doute : en physique classique on entend par "réalité physique" ou "réalisme" le fait qu'un système a des propriétés intrinsèques indépendantes de l'observation ou non que l'on fait du système. Dans ce sens, la mécanique quantique n'est pas réaliste : la position d'un électron n'est, en général, pas définissable (c'est-à-dire qu'elle n'a qu'une certaine distribution de probabilité) si elle n'est pas mesurée !!!

En physique quantique, la notion de "réalité physique" est indiscutablement plus "floue" et plus "circonstancielle" qu'en physique classique. C'est comme cela !

4ème règle de l'étudiant(e) en mécanique quantique : la philosophie, c'est mauvais pour la santé des jeunes !

* Une "difficulté", dans le contexte de l'expérience à deux trous par exemple vient de questions du genre : "comment l'électron fait-il réellement pour passer de l'autre côté de l'écran percé de deux trous quand on n'observe pas par quel trou il passe?". La seule réponse honnête est : "je ne sais pas !" Mais c'est la même réponse qu'il faut donner à la question "comment la lune fait-elle, réellement, pour tourner autour de la terre?". Bien sûr je peux écrire les équations de Newton, et les intégrer et, tout aussi bien sûr, je peux résoudre l'équation de Schrödinger et calculer la probabilité d'arrivée d'un électron sur l'écran C !

5ème règle de l'étudiant(e) en mécanique quantique : la nature lit des bouquins de maths ! (Galilée)

Avec ces règles, un peu de bon sens et beaucoup de travail il est trivial de comprendre la mécanique quantique ! Bon amusement !

P.S. Cet Appendice n'est pas matière d'examen !

Appendice 1

L'équation de Schrödinger

Comme promis, dans cet appendice nous dérivons l'équation de Schrödinger à partir des principes de la mécanique quantique. Pour rappel, nous considérons le cas d'une particule *non relativiste*, de masse m , dans un potentiel $V(x)$. Classiquement le lagrangien est donc donné par

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 - V(x).$$

Pour dériver l'équation de Schrödinger, nous partons de l'équation (2.7) pour l'amplitude de Schrödinger $\Psi(x, t)$, à savoir

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, t; y, t_1) \Psi(y, t_1) dy$$

et nous appliquons cette équation dans le cas où t diffère infinitésimalement de t_1 . En changeant de notation nous pouvons écrire

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(x, t + \varepsilon; y, t) \Psi(y, t) dy.$$

Le noyau de cette équation peut s'approximer à l'ordre ε de la manière suivante :

$$\begin{aligned} A(x, t + \varepsilon; y, t) &\cong N(\varepsilon) \exp \frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\varepsilon} L dt \\ &\cong N(\varepsilon) \exp \frac{i\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x-y}{\varepsilon}, \frac{x+y}{2} \right) \end{aligned}$$

où $N(\varepsilon)$ est un "facteur de normalisation" qui peut dépendre de ε . Pour chaque chemin infinitésimal de (y, t) à $(x, t + \varepsilon)$ nous avons bien que

$$A_C(x, t + \varepsilon; y, t) \approx \exp \frac{i}{\hbar} S_C \cong \exp i \frac{\varepsilon}{\hbar} L \left(\frac{x-y}{\varepsilon}, \frac{x+y}{2} \right)$$

puisque, à cet ordre $\dot{x} \approx \frac{x-y}{\varepsilon}$ etc ... En sommant sur tous les chemins nous devons simplement introduire le facteur $N(\varepsilon)$.

Dès lors

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} N(\varepsilon) \exp \frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{\varepsilon} \exp \frac{-i\varepsilon}{\hbar} V \left(\frac{x+y}{2} \right) \Psi(y, t) dy.$$

Dans cette expression, $\exp \frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{\varepsilon}$ va osciller violemment en fonction de y pour tout y très différent de x et comme les autres facteurs $\Psi(y, t)$ et $\exp \frac{-i}{\hbar} V\left(\frac{x+y}{2}\right)$ sont à variation douce, le résultat de l'intégration sera nul. Ce n'est que dans le cas où y est proche de x que nous aurons des contributions significatives. Physiquement ce résultat est évidemment raisonnable ! Nous changeons donc encore une fois de variable en posant $y = x + \eta$. Dès lors

$$\Psi(x, t + \varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} N(\varepsilon) \exp \frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \exp -\frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(x + \frac{\eta}{2}\right) \Psi(x + \eta, t) d\eta.$$

Les contributions importantes dans l'intégrale sur η viendront de la région η de l'ordre $\left(\frac{2\varepsilon\hbar}{m}\right)^{1/2}$. Pour ε infinitésimal, η^2 est donc d'ordre ε . Nous pouvons à présent développer en séries et, à l'ordre ε ,

$$\begin{aligned} \Psi(x, t + \varepsilon) &= \Psi(x) + \varepsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ \Psi(x + \eta, t) &= \Psi(x) + \eta \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \\ \exp -\frac{i\varepsilon}{\hbar} V\left(x + \frac{\eta}{2}\right) &= 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x) \end{aligned}$$

et par conséquent

$$\Psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \int_{-\infty}^{+\infty} N(\varepsilon) e \frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \left[1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x)\right] \left\{ \Psi(x, t) + \eta \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \dots \right\} d\eta.$$

À l'ordre 0 en ε , le membre de gauche est simplement $\Psi(x, t)$, tandis que dans le membre de droite nous avons $\Psi(x, t)$ multipliée par le facteur

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N(\varepsilon) e \frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} d\eta$$

qui doit donc être égal à 1. Comme

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(\alpha x^2 + \beta x) dx = \sqrt{\frac{\pi}{-\alpha}} \exp -\frac{\beta^2}{4\alpha}, \quad \Re(\alpha) \leq 0$$

nous en tirons $N(\varepsilon) = \left(\frac{2\pi i \hbar \varepsilon}{m}\right)^{-1/2}$. Avec les valeurs des intégrales

$$\int_{-\infty}^{+\infty} N(\varepsilon) e \frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \eta d\eta = 0 \quad \text{et} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} N(\varepsilon) e \frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon} \eta^2 d\eta = \frac{i\hbar\varepsilon}{m}$$

nous obtenons finalement

$$\Psi(x, t) + \varepsilon \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi(x, t) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} V(x) \Psi(x, t) + \frac{i\hbar\varepsilon}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

soit encore, à l'ordre ε

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} V(x) \Psi(x, t) + \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

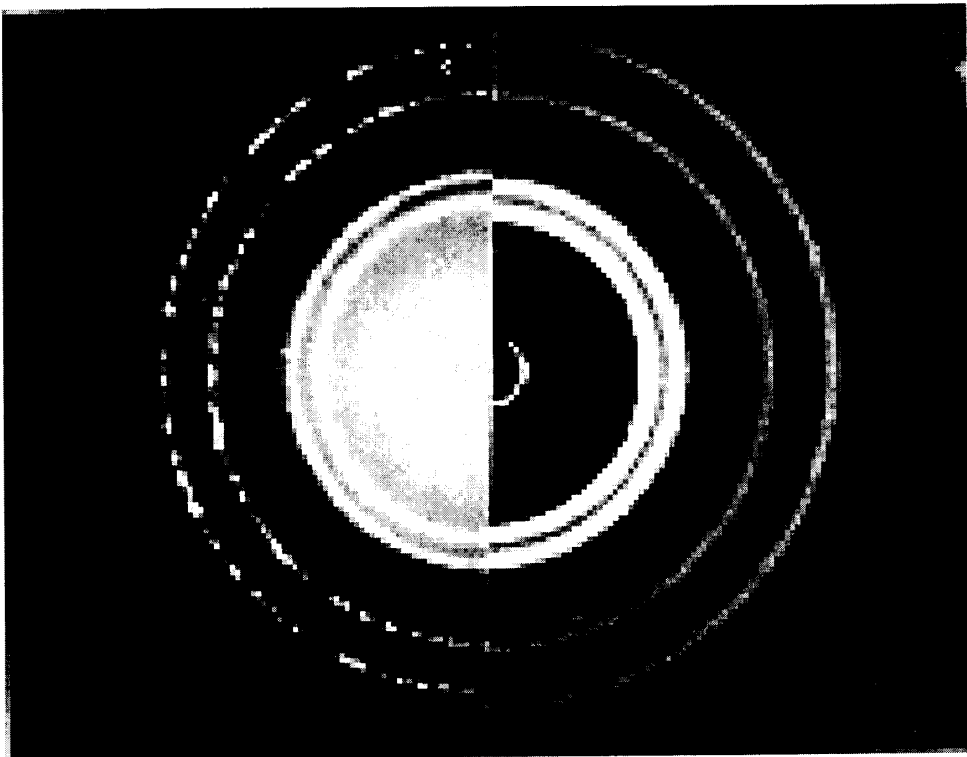
qui n'est autre que l'équation de Schrödinger.

Appendice 2

Particules et Ondes

Dans cet appendice nous revenons sur quelques assertions faites dans les deux premiers chapitres concernant les notions de “particules” et d’“ondes”.

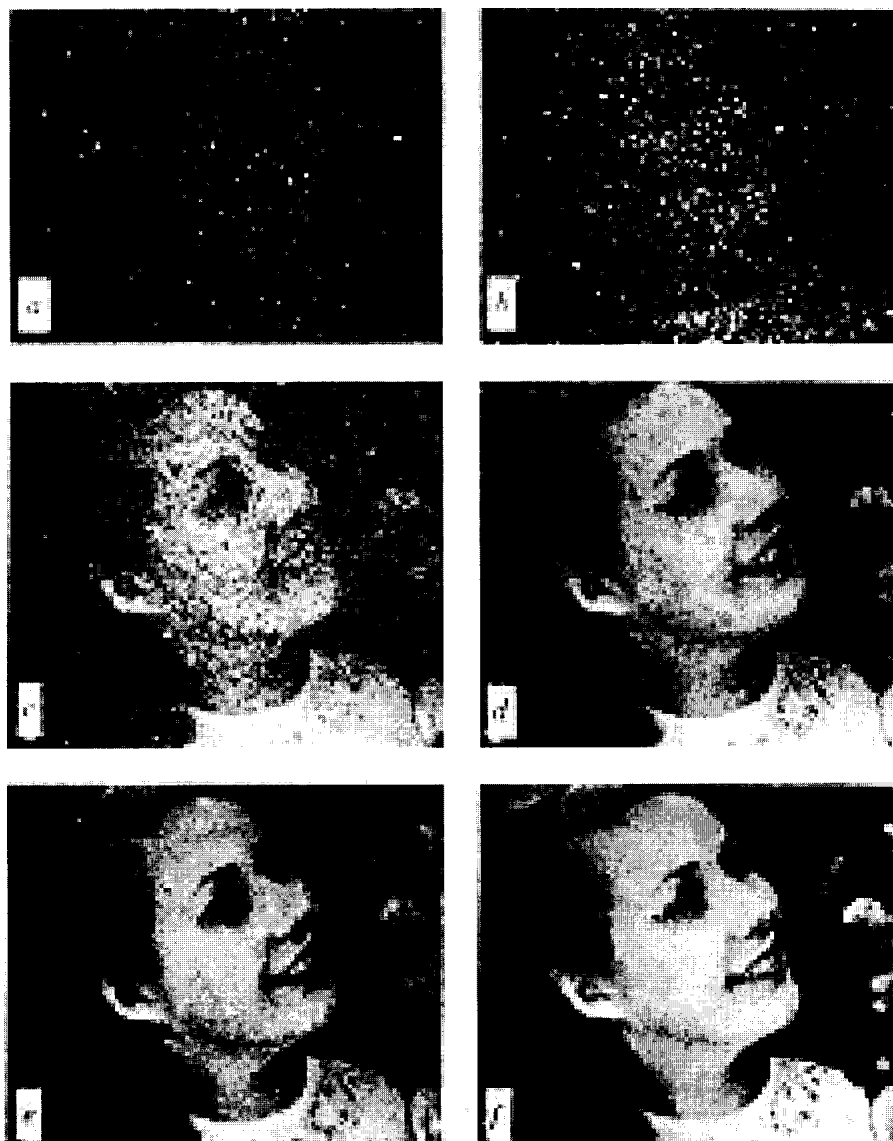
Pour rendre la discussion aussi concrète que possible, examinons les résultats expérimentaux de la diffusion par une feuille d’aluminium d’un faisceau d’électrons et d’un faisceau de rayons x.



La similitude des figures est frappante. Et bien entendu la description et l’explication correcte du phénomène sont les mêmes dans les deux cas : électrons et photons sont des particules qui obéissent aux lois de la physique quantique et les figures de diffraction découlent de ces lois comme nous le verrons en détail dans la suite.

Dans les deux cas, les figures de diffraction peuvent s’obtenir en faisant l’expérience avec des électrons ou des photons qui arrivent un à un. C’est dans ce sens qu’il n’y a aucun doute

sur la nature corpusculaire de l'électron et du photon : on peut les compter. D'autre part, il n'y a nul besoin de mécanique quantique pour obtenir la figure de diffraction dans le cas des rayons x : le champ électromagnétique donné par des solutions des équations de Maxwell est parfaitement bien décrit par une *onde* dont la nature physique est bien réelle (ondes radio p.ex.). Dans le contexte de la mécanique quantique, l'onde électromagnétique "classique" est une superposition cohérente d'un très grand nombre de *photons*. Ce point est magnifiquement illustré par la série de photographies suivante (French, p. 89).



Ceci est également une "preuve expérimentale" de la "limite classique" de la mécanique quantique. Un très grand nombre de photons peut très bien se comporter comme une "onde électromagnétique" et il n'y a aucune confusion conceptuelle dans cette assertion. La structure "ultime" de la lumière est corpusculaire même si un grand nombre de ces corpuscules ont, ensemble, un comportement ondulatoire. (Une corde vibrante est un ensemble de molécules

et il n’y a rien de mystérieux dans le comportement ondulatoire de ce grand nombre de particules).

La véritable confusion conceptuelle vient de la tentation d’interpréter les figures de diffraction des électrons en terme d’une onde (physique réelle) analogue au champ électromagnétique !

La source de cette confusion remonte à L. de Broglie qui en 1924 propose une théorie “révolutionnaire” de la matière et de la lumière basée sur la “dualité onde-particule”. Nous y voilà !

de Broglie commence par analyser en détail les conséquences de la relation d’Einstein $E = h\nu$ dans le contexte de la relativité restreinte. Le résultat essentiel de son analyse est la relation

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1)$$

que de Broglie exprime grosso modo de la manière suivante : à toute *particule* d’impulsion p est associée une onde de longueur d’onde $\frac{h}{p}$.

Nous avons déjà (trivialement) dérivé la relation (1) pour des photons (particules de masse nulle) à partir des relations d’Einstein $E = h\nu = cp$. de Broglie, quant à lui, postule que le photon a une masse au repos non-nulle m_0 et commence son analyse dans le repère au repos de ce photon “massif” avec $h\nu_0 = m_0 c^2$. Il en déduit alors la relation (1) (ce n’est pas trivial!) et conclut audacieusement à l’universalité de cette relation et donc à la “dualité onde-particule”.

L’idée de de Broglie est spectaculairement confirmée (entre autres) par l’expérience de G.P. Thompson (le fils de J.J.!) sur la diffraction des électrons. Dans cette expérience, les électrons ont une énergie de l’ordre de 10–40 keV, leur “longueur d’onde de de Broglie” est de l’ordre du dixième d’Angström et les figures de diffraction sont en accord remarquable avec les prédictions de de Broglie.

Malgré ces succès éclatants et sans le moins du monde mettre en cause le rôle historique capital de de Broglie, force est de constater son idée est la source de bien des confusions conceptuelles : il n’y a pas, dans aucun sens physique du terme, d’onde réelle associée à l’électron !

Dans le contexte de la mécanique quantique — et nous le montrerons explicitement dans le chapitre suivant — c’est *l’amplitude de probabilité d’une particule libre* d’impulsion p qui a la structure mathématique d’une onde de longueur d’onde $\frac{h}{p}$.

Dans ce sens, les succès expérimentaux de la relation de de Broglie sont des succès

expérimentaux de la mécanique quantique tandis que la “dualité onde-particules” est une confusion conceptuelle qui devrait être rangée dans les oubliettes de l’histoire !

En résumé :

- électrons, photons (de même que neutrons, photons etc ...) sont des *particules* (on peut les compter);
- pour une particule libre d’impulsion p , l’amplitude de Schrödinger a la structure mathématique d’une onde (de longueur d’onde $\lambda = \frac{h}{p}$) mais l’amplitude de probabilité n’est pas une onde physique qui se propage dans l’espace !

Chapitre III

L'équation de Schrödinger : généralités

Dans le chapitre précédent nous avons exposé les principes de la mécanique quantique dans le “formalisme des intégrales de chemin” encore appelé “formalisme fonctionnel”. Dans la limite non relativiste, nous en avons déduit l'équation de Schrödinger. Cette équation est souvent prise comme un point de départ du “formalisme opératoire” de la mécanique quantique.

Le formalisme fonctionnel est de loin le plus simple conceptuellement tandis que le formalisme opératoire est considérablement plus pratique pour des problèmes “simples” et en particulier pour des “états liés”.

Dans ce chapitre, nous mettons en place quelques ingrédients du formalisme opératoire (opérateurs, espace de Hilbert etc ...). Dans la mesure du possible nous donnons des arguments et des exemples physiques des diverses notions dont nous aurons besoin. Le but reste toujours d'expliquer et de comprendre les phénomènes physiques observés à l'échelle atomique et les concepts mathématiques sont utilisés à cette fin.

I L'opérateur position \hat{x}

Pour la simplicité de l'exposé nous considérons un “système physique” constitué d'une particule non relativiste de masse m qui se meut dans un espace unidimensionnel (x) en présence d'un potentiel $V(x)$ réel.

L'amplitude de Schrödinger $\Psi(x, t)$ est une fonction complexe de la variable x (appelée “variable de position”) et du temps t . L'évolution au cours du temps de cette amplitude est dictée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi. \quad (3.1)$$

C'est avec cela que nous voulons faire de la physique !

This document is available free of charge on



Une des hypothèses de base de la mécanique quantique est que $\Psi(x, t)$ fournit *toute l'information* sur notre système. On exprime cette hypothèse en disant que le système physique est dans l'état $|\Psi\rangle$. (L'utilité de ce jargon et de cette notation apparaîtront plus tard). Par “toute l'information sur le système” on entend en particulier tout ce qu'on peut mesurer comme, par exemple, l'énergie du système, sa position, son impulsion etc ...

Comment définit-on ces grandeurs ? Comment prépare-t-on un système pour qu'il soit dans l'état $|\Psi\rangle$ et qu'est-ce que cela veut dire ? Comment compare-t-on ce qui est mesuré en laboratoire avec les “prédictions” de la mécanique quantique ?

Nous allons petit à petit répondre à toutes ces questions.

Nous avons déjà mentionné que la *probabilité* de trouver la particule dans un intervalle dx autour du point x au temps t était donnée par

$$P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t)dx \quad (3.2)$$

Cette équation est une définition de la *densité* de probabilité (ou de la distribution de probabilité) $P(x, t)$.

Pour que cette définition aie du sens, il faut bien entendu que

$$\int_D P(x, t)dx = 1 = \int_D |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.3)$$

où l'intégrale porte sur la région de l'espace accessible à la particule (le “domaine” D). En particulier si on enferme la particule dans une boîte (unidimensionnelle) $0 \leq x \leq L$ les bornes d'intégration seront 0 et L tandis que pour une particule qui peut se promener sur tout l'axe des x , les bornes d'intégration seront $-\infty$ et $+\infty$ respectivement.

Une amplitude de Schrödinger qui satisfait l'équation (3.3) sera dite normée ou normalisée. Mathématiquement, des fonctions qui satisfont l'équation (3.3) sont appelées des “fonctions de carré sommable”. Physiquement il est souvent très commode de considérer des amplitudes non normalisées comme nous le verrons bientôt. L'équation (3.2) reste bien sûr valable dans ce cas et on pourra toujours calculer des probabilités relatives.

Nous définissons à présent l'*opérateur* \hat{x} que nous appellerons l'opérateur position.

$$\hat{x}\Psi(x, t) \stackrel{\text{def}}{=} x\Psi(x, t) \quad (3.4)$$

L'effet de l'opérateur \hat{x} sur une amplitude est de multiplier celle-ci par x . Nous distinguons l'opérateur \hat{x} de la variable x !!! À ce stade, c'est de la pédanterie pure ...

Une autre définition utile est celle de *position moyenne*, notée $\langle \hat{x} \rangle$.

$$\langle \hat{x} \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_D x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (3.5)$$

$$\begin{aligned} &= \int_D \Psi^*(x, t) \left[x \Psi(x, t) \right] dx \\ &= \int_D \Psi^*(x, t) \left[\hat{x} \Psi(x, t) \right] dx \end{aligned} \quad (3.6)$$

Le nombre $\langle \hat{x} \rangle$ est également appelé *valeur moyenne de l'opérateur \hat{x}* (Eq. (3.6)) ou valeur moyenne de la variable x (Eq. (3.5)).

Nous pouvons à présent esquisser ce qu'on entend par “mesure de la position d'une particule quantique”. Pour fixer les idées prenons un électron comme prototype de particule quantique. En principe mesurer la position d'un électron ne pose pas de difficulté (compteur Geiger) et il n'y a rien de mystérieux dans le procédé de mesure, mais ...

L'amplitude de Schrödinger est censée donner toute l'information concernant un électron et une mesure de la position de cet électron ne va pas nous apprendre grand chose sur la mécanique quantique. Pour comparer les prédictions de la mécanique quantique (théorie probabiliste) à l'expérience il faut répéter la même expérience un très très grand nombre de fois. Hélas c'est impossible de refaire la même expérience avec le même électron ! Mais tout n'est pas perdu : on peut répéter la même expérience (mesure de position) avec un grand nombre d'électrons à condition que tous ces électrons soient dans le même état $|\Psi\rangle$ c'est-à-dire aient la même amplitude $\Psi(x, t)$. (On dira que les électrons sont “préparés” dans l'état $|\Psi\rangle$). Peu importe pour l'instant ce que cela signifie exactement (nous y reviendrons). Avec un “faisceau d'électrons” (tous dans le même état) nous pouvons alors “mesurer la position d'un électron”. Avec un dispositif expérimental du type compteur Geiger (dans notre monde unidimensionnel !!) le résultat sera une “distribution de points (d'impact) et la valeur moyenne $\langle \hat{x} \rangle$ de cette distribution est alors déterminée expérimentalement. Si on connaît $\Psi(x, t)$ ou peut calculer théoriquement $\langle \hat{x} \rangle$ à partir de l'équation (3.5) ou (3.6) et la comparaison “théorie-expérience” devient possible.

Toute cette discussion vise à illustrer la notion de “grandeur mesurable” ou “observable” dans le contexte de la mécanique quantique.

Pour résumer ce qui précède, la *position* d'une particule quantique est appelée une *observable*. Cette observable est *représentée* par l'opérateur \hat{x} (agissant sur une amplitude). Dans les paragraphes qui suivent nous allons argumenter que toute observable en mécanique quantique est représentée par un opérateur et ça, ce n'est plus de la pédanterie !

Mais, avant cela, revenons un instant aux résultats de l'expérience “mesure de la position” d'un électron. Nous avons défini la valeur moyenne de la distribution observée mais nous

pouvons également caractériser la dispersion de cette distribution. La notion habituelle en théorie des probabilités est celle de déviation-standard ou d'écart-type. Nous notons cet écart-type Δx ; il est défini par

$$(\Delta x)^2 = \int \Psi^*(x, t)(\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle)^2 \Psi(x, t) dx \quad (3.7a)$$

$$= \int \Psi^*(x, t)(x - \langle \hat{x} \rangle)^2 \Psi(x, t) dx \quad (3.7b)$$

Il est très instructif de passer maintenant à la “limite classique” de la mécanique quantique. Supposons donc qu'on mesure la position de boules de canon plutôt que celle d'électrons. Le dispositif expérimental sera un petit peu différent mais vous connaissez le résultat : la distribution des valeurs de la position d'une boule de canon est évidemment “toujours la même valeur” (une position unique). La valeur moyenne de cette distribution est cette valeur unique et l'écart-type est nul.

Dès lors, dans la limite classique

$$\langle \hat{x} \rangle_{t_0} \longrightarrow x_{\text{classique}}(t_0) \quad (3.8)$$

$$\Delta x \longrightarrow 0$$

Nous avons ajouté un indice t_0 pour être tout à fait explicite (il s'agit d'une mesure de la position au temps t_0)

$$\langle \hat{x} \rangle_{t_0} = \int dx \Psi^*(x, t_0) \hat{x} \Psi(x, t_0).$$

Attention ! L'équation (3.8) ne signifie pas que $\langle \hat{x} \rangle_{t_0}$ a une “limite classique” !

II L'opérateur impulsion \hat{p}

L'opérateur position \hat{x} défini par l'équation (3.4) ne dépend pas du temps mais la position moyenne $\langle \hat{x} \rangle$, Eq.(3.5) est une fonction du temps puisqu'elle dépend de l'amplitude de Schrödinger $\Psi(x, t)$ (et de la complexe conjuguée de cette amplitude). L'équation de Schrödinger va donc nous permettre de déterminer l'évolution au cours du temps de $\langle \hat{x} \rangle$. Nous explicitons le calcul pour une particule dont le domaine est l'axe réel tout entier

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}(x, t) x \Psi(x, t) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x, t) dx. \quad (3.9)$$

En utilisant l'équation de Schrödinger et sa complexe conjuguée, à savoir

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V(x) \Psi^* \quad (3.10)$$

L'équation (3.9) devient

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial^2 \Psi^*(x,t)}{\partial x^2} x \Psi(x,t) dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{i}{\hbar} \right) V(x) \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{-\hbar}{2mi} \Psi^*(x,t) x \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \Psi^*(x,t) x V(x) \Psi(x,t) dx \end{aligned}$$

Les deuxième et quatrième termes s'éliminent. Nous intégrons par parties les autres termes en supposant bien sûr que $\Psi(x,t)$ tend suffisamment vite vers zéro pour que les termes intégrés s'annulent.

Explicitement

$$\frac{\partial^2 \Psi^*(x,t)}{\partial x^2} x \Psi(x,t) = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} x \Psi(x,t) \right\} - \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} \Psi(x,t) - \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} x \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}$$

et de même

$$\Psi^*(x,t) x \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \Psi^*(x,t) x \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right\} - \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} x \frac{\partial \Psi}{\partial x}.$$

Comme, par hypothèse

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left\{ \frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} x \Psi(x,t) \right\} dx = 0,$$

on trouve

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle = \frac{\hbar}{2mi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -\frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} \Psi(x,t) + \Psi^*(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} \right\} dx$$

et une dernière intégration par parties donne finalement

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle = \frac{\hbar}{mi} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,t) dx \quad (3.11)$$

ou encore

$$\boxed{m \frac{d}{dt}\langle \hat{x} \rangle = \left\langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right\rangle} \quad (3.12)$$

$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ est effectivement un opérateur agissant dans l'espace des fonctions de carré sommable.

Son action sur une amplitude de Schrödinger est évidemment

$$\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x,t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}. \quad (3.13)$$

La signification physique de cet opérateur devient claire lorsqu'on passe à la limite classique de la mécanique quantique

$$\langle \hat{x} \rangle \xrightarrow{\text{limite classique}} x_{\text{class}}(t)$$

$$\text{et } m \frac{dx_{\text{class}}}{dt}(t) = p_{\text{class}}(t) \quad (3.14)$$

et par conséquent, l'opérateur “impulsion” \hat{p} peut être identifié à $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$\boxed{\hat{p} \stackrel{\text{def}}{=} -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}} \quad (3.15)$$

et l'équation (3.12) s'écrit très agréablement sous la forme

$$\boxed{m \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle}. \quad (3.16)$$

Dans le jargon introduit au paragraphe précédent et avec les mêmes abus de langage on dira que l'*impulsion* d'une particule quantique est une *observable* qui est représentée par l'opérateur \hat{p} (agissant sur une amplitude).

Il est intéressant de calculer la variation au cours du temps de la valeur moyenne de l'impulsion. Le calcul est élémentaire et donne

$$\boxed{\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\langle \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \rangle} \quad (3.17)$$

cette relation est appelée le “théorème d'Ehrenfest”.

La signification physique du théorème d'Ehrenfest est également claire lorsqu'on passe à la limite classique de la mécanique quantique

$$\begin{aligned} \langle \hat{p} \rangle & \xrightarrow{\text{limite classique}} p_{\text{classique}}(t) \\ \frac{dp_{\text{classique}}}{dt} & = F_{\text{class}} = -\frac{\partial V_{\text{class}}}{\partial x_{\text{class}}} \\ -\langle \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \rangle & \xrightarrow{\text{limite classique}} = -\frac{\partial V_{\text{class}}}{\partial x_{\text{class}}} = F_{\text{classique}} \end{aligned}$$

dans la limite classique, le théorème d'Ehrenfest devient la “loi de Newton”.

Cette assertion est correcte, mais il est important ici de ne pas faire de confusion : le théorème d'Ehrenfest n'est pas la loi de Newton, $\langle \hat{p} \rangle$ n'est pas l'impulsion, $-\langle \frac{\partial \hat{V}}{\partial x} \rangle$ n'est pas la force et qui plus est $\langle \hat{x} \rangle$ n'est même pas la position !

Les notions de position, impulsion, ... sont des notions classiques qui strictement ne sont pas toujours bien définies en mécanique quantique (i.e. ne sont pas, en général, des “attributs” d'une particule quantique). “Position” et “Impulsion” sont des *observables* (c'est quelque chose que l'on peut mesurer ou, plus précisément, ce sont des notions auxquelles on peut donner un sens opérationnel précis). Une mesure de la “position” ou une mesure de l’“impulsion” pour un grand nombre de particules quantiques toutes dans le même état (i.e. avec la même amplitude de Schrödinger) donne en général une distribution dont, bien sûr, la

valeur moyenne est bien définie. Ce sont ces valeurs moyennes que l'on calcule en mécanique quantique en prenant la "valeur moyenne d'un opérateur représentant l'observable" en question et c'est dans ce sens que "l'observable position est représentée par l'opérateur \hat{x} " ou "l'observable impulsion est représentée par l'opérateur \hat{p} ".

C'est un abus de langage de dire que $\langle \hat{x} \rangle$ est la "position d'une particule quantique" ou même que \hat{x} est l'opérateur position. Une fois qu'on a compris de quoi il s'agissait, il n'y a évidemment aucune objection à ces abus de langage : ils sont très commodes et très "intuitifs". La mécanique quantique est une théorie "abstraite" : il y a des amplitudes de probabilité et comme nous l'avons vu au chapitre précédent une amplitude de probabilité est définie à partir de la notion d'action (S). Pour calculer pratiquement une amplitude de probabilité nous sommes passés à la "formulation locale" de la mécanique quantique non relativiste et avons obtenu l'équation de Schrödinger. Les amplitudes de Schrödinger, solutions de l'équation du même nom, sont des fonctions qui se promènent dans un "espace de fonctions" et pas dans l'espace "réel" (jusqu'à présent unidimensionnel). L'opérateur \hat{x} , par exemple, est défini sur cet espace de fonctions. Ce n'est vraiment pas la même chose que x qui est un point de notre espace réel !

Un autre abus de langage qui est la source de bien des confusions concerne la "limite classique de la mécanique quantique" d'une part et l'équation de Schrödinger d'autre part. Dans la formulation donnée ici, la mécanique quantique est une "théorie d'amplitudes de probabilité". Dans la limite classique de cette théorie, toutes les amplitudes de probabilité s'annulent sauf celle qui correspond à une trajectoire classique (à des \hbar près). Dès lors il n'y a pas d'équation de Schrödinger dans cette limite !

III La relation d'incertitude d'Heisenberg

Dans les paragraphes précédents nous avons introduit les opérateurs \hat{x} et \hat{p} . Une propriété mathématique élémentaire de ces opérateurs est qu'ils ne commutent pas. Les conséquences physiques de cette propriété mathématique vont absolument au coeur même de la mécanique quantique.

Pour tout amplitude de Schrödinger nous avons défini

$$\hat{x}\Psi(x, t) = x\Psi(x, t)$$

et

$$\hat{p}\Psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x, t).$$

Dès lors

$$\begin{aligned}\hat{p}\hat{x}\Psi(x, t) &= \hat{p}\left\{\hat{x}\Psi(x, t)\right\} = \hat{p}\left(x\Psi(x, t)\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x\Psi(x, t)\right) \\ &= -i\hbar\Psi(x, t) - i\hbar x \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}\end{aligned}\quad (3.18)$$

tandis que

$$\hat{x}\hat{p}\Psi(x, t) = \hat{x}\left\{\hat{p}\Psi(x, t)\right\} = \hat{x}\left\{-i\hbar\frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}\right\} = -i\hbar x \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial x}.\quad (3.19)$$

L'action de l'opérateur $\hat{p}\hat{x}$ sur une amplitude de Schrödinger est différente de celle de l'opérateur $\hat{x}\hat{p}$. On exprime cette propriété au moyen du *commutateur* de ces deux opérateurs

$$[\hat{p}, \hat{x}] \stackrel{\text{def}}{=} \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}\quad (3.20)$$

Des équations (3.18) et (3.19) on déduit que

$$[\hat{p}, \hat{x}]\Psi(x, t) = -i\hbar\Psi(x, t)$$

et comme cette identité est valable pour n'importe quelle fonction de carré sommable on l'écrit sous forme de l'identité opératorielle

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar\mathbb{1}\quad (3.21)$$

qui se lit comme suit : “le commutateur des opérateurs \hat{p} et \hat{x} est égal à $-i\hbar$ fois l'opérateur unité.

De l'identité opératorielle (3.21) on déduit le “théorème d'Heisenberg” encore appelé relation d'incertitude d'Heisenberg à savoir

$$\boxed{(\Delta p)(\Delta x) \geq \frac{1}{2}\hbar}.\quad (3.22)$$

Nous donnerons ultérieurement la démonstration de ce théorème. La signification physique de cette relation d'incertitude sera d'abord illustrée dans le cas de quelques exemples simples.

IV Etats stationnaires et quantification de l'énergie

Nous pouvons à présent nous attaquer à l'équation de Schrödinger Eq.(3.1) et chercher des solutions par séparation des variables. Nous posons

$$\Psi(x, t) = \phi(x)f(t).\quad (3.23)$$

En substituant dans l'équation de Schrödinger, on obtient

$$\left(i\hbar \frac{df}{dt}\right)\phi(x) = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi(x)\right\}f(t)$$

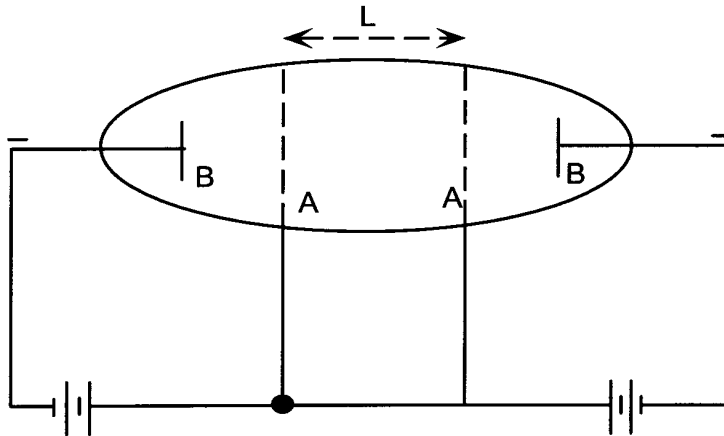
soit encore

$$\frac{i\hbar df/dt}{f} = \frac{\left\{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi(x)\right\}}{\phi}. \quad (3.24)$$

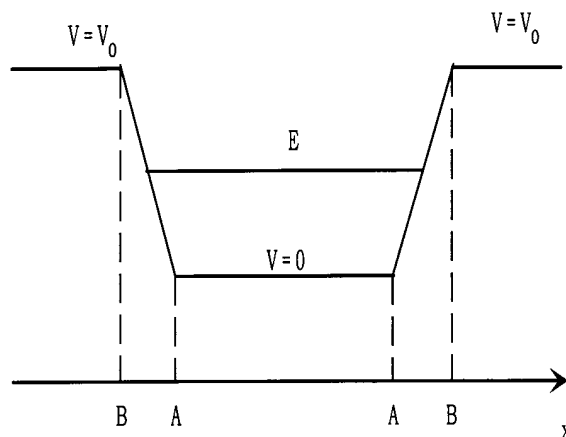
Comme le membre de gauche de l'équation (3.24) ne dépend que de t et que le membre de droite ne dépend que de x , il ne pourra y avoir de solution de la forme (3.23) que si l'équation (3.24) est égale à une *constante* (qui ne dépend donc ni de t ni de x). Cette constante a la dimension d'une énergie, appelons-la E . Dès lors $i\hbar \frac{df}{dt} = Et$ et par conséquent $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$ tandis que

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + V\phi(x) = E\phi(x)} \quad (3.25)$$

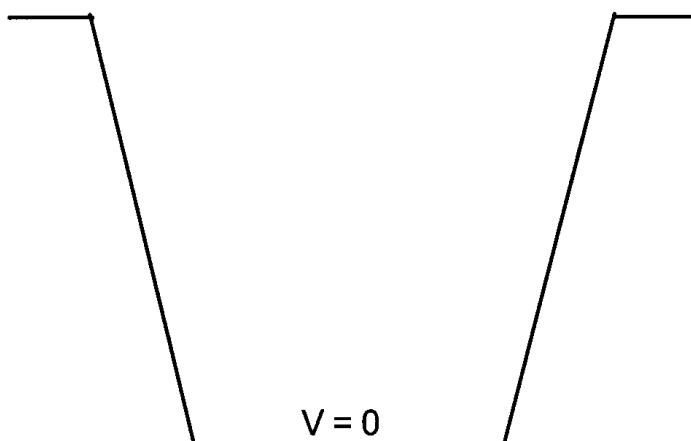
qu'on appelle "l'équation de Schrödinger indépendante du temps". C'est cette équation que nous allons résoudre maintenant dans le cas le plus simple qui soit à savoir pour une particule libre confinée dans une boîte de longueur L i.e. $0 \leq x \leq L$. Il n'est pas difficile d'imaginer un dispositif expérimental qui simule cette situation.



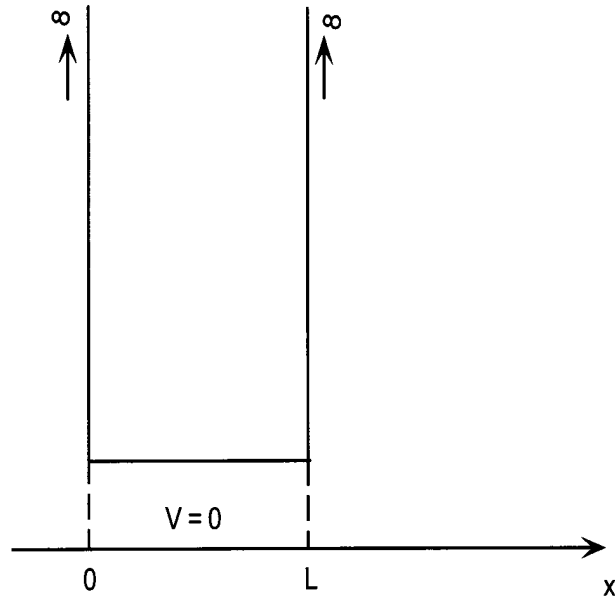
tant que l'électron se promène entre les deux grilles, aucune force électrique ne s'exerce sur lui. S'il dépasse une de ces grilles (entre A et B), il entre dans une région où un champ électrique le repousse vers l'intérieur de la boîte (i.e. entre les grilles A). Du point de vue énergétique on peut représenter la situation comme suit :



avec E , l'énergie de la particule. Tant que $E < V_0$ l'électron est confiné et ne s'échappera pas de la boîte. En augmentant V_0 les “murs” de la boîte deviennent de plus en plus rigides.



et dans la limite $V_0 \rightarrow \infty$ nous pouvons idéaliser la situation comme étant celle d'une particule confinée dans une boîte de longueur L . C'est vraiment la modélisation la plus simple d'un “état lié” c'est-à-dire d'une particule confinée dans une région finie de l'espace. Nous allons résoudre le problème dans le cas limite



Puisque nous nous sommes arrangés pour que l'électron ne puisse pas sortir de la boîte de longueur L , la probabilité de le trouver en dehors de la boîte doit être nulle et il est aisé d'implémenter cette condition

$$\Psi(x, t) = 0 \quad \text{pour} \quad x \leq 0 \quad (3.26)$$

$$\Psi(x, t) = 0 \quad \text{pour} \quad x \geq L. \quad (3.27)$$

Dans la boîte nous avons l'équation de Schrödinger indépendante du temps à savoir

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = E \phi(x) \quad (3.28)$$

qui n'est autre que l'équation (3.25) avec $V = 0$. En posant $\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2$ l'équation (3.26) s'écrit

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = -k^2 \phi \quad (3.29)$$

dont la solution générale est donnée par

$$\phi(x) = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx} \quad (3.30)$$

avec C_1 et C_2 constants.

La condition (3.26), $\phi(0) = 0$ implique $C_1 + C_2 = 0$ et par conséquent $\phi(x) = 2iC_1 \sin kx$. Il nous reste à imposer la dernière conditions eq. (3.27) à savoir

$$\phi(L) = 0$$

soit encore $\sin kL = 0$ et

$$kL = n\pi \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.31)$$

Les valeurs permises de k sont donc discrétisées et dès lors notre problème d'une particule confinée dans une boîte n'admet de solution du type (3.23) que pour certaines valeurs de l'énergie

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}} \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.32)$$

L'énergie est, comme on dit, “quantifiée”.

Il est tout à fait remarquable que la “quantification de l'énergie” découle de considérations aussi élémentaires. Confiner une particule quantique implique des “conditions au bord” sur l'amplitude de Schrödinger qui à leur tour implique des valeurs *discrètes* de l'énergie. Le modèle considéré ici est évidemment très grossier mais la discrétisation des “valeurs possibles de l'énergie” est un résultat général. Bien sûr les valeurs précises que prend l'énergie et le nombre de ces valeurs vont être différents dans différents potentiels. Nous verrons de nombreux exemples dans le chapitre prochain.

Résumons la situation : pour les valeurs E_n (Eq. (3.37)) et seulement pour celles-là, nous avons trouvé une amplitude de Schrödinger (non normalisée) donnée par

$$\Psi_n(x, t) = A_n \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar} \quad n = 1, 2, \dots \quad (3.33)$$

La “quantification de l'énergie” qui est à l'origine du nom même donné à la mécanique “quantique” n'a rien de mystérieux ou d'obscur dans le contexte d'une amplitude de probabilité solution de l'équation de Schrödinger.

Nous avons donc résolu explicitement un petit modèle idéalisant une situation physique concrète (état-lié). Il est extrêmement utile pour développer une intuition physique de la mécanique quantique de se poser et de résoudre le plus grand nombre de questions possibles sur ces amplitudes que nous venons de découvrir. Nous en explicitons quelques unes ci-dessous (n est fixé, mais arbitraire sauf mention contraire).

- **normalisation**

$$\int_0^L dx |\Psi(x, t)|^2 = 1 \quad \Rightarrow |A_n|^2 = \frac{2}{L} \quad \text{et par conséquent } A_n = e^{i\alpha_n} \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (3.34)$$

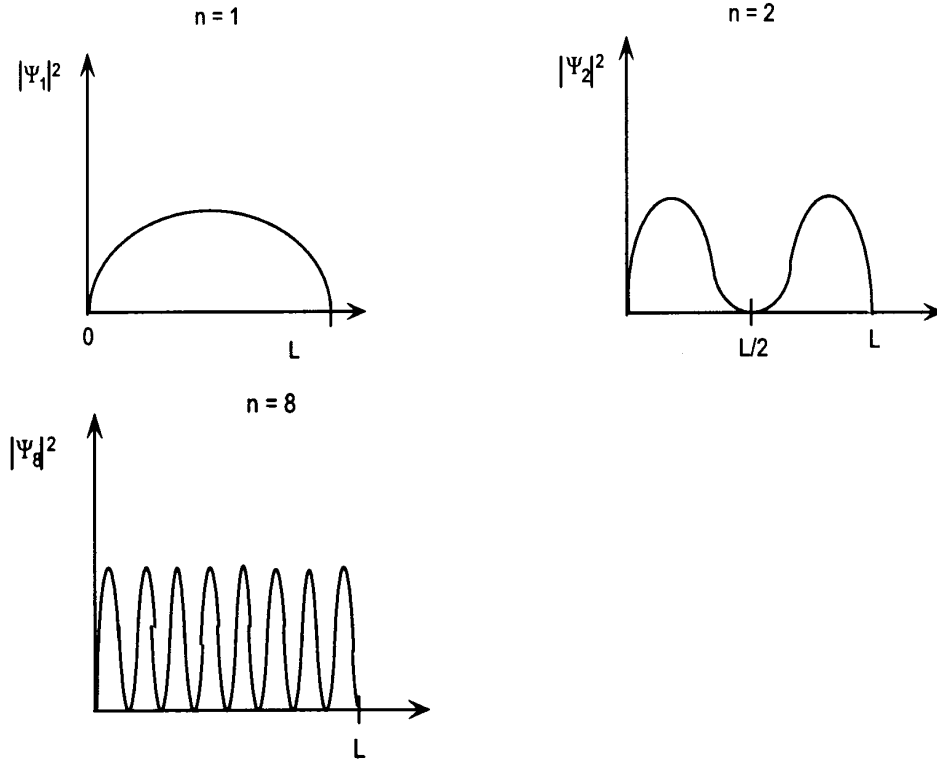
les amplitudes de Schrödinger ne sont définies qu'à une phase près : α_n est un nombre réel et peut très bien être différent pour des n différents

- **densité de probabilité**

$$P(x, t) = |\Psi_n(x, t)|^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} \quad (3.35)$$

Quelle que soit la valeur de n , cette densité de probabilité est *indépendante* du temps. La probabilité de trouver l'électron quelque part est constante. C'est de là que vient l'expression "état stationnaire".

Explicitement



Calculez explicitement la probabilité de trouver la particule dans diverses régions de la boîte p.ex. $0 \leq x \leq \frac{L}{4}$, $\frac{L}{4} \leq x \leq \frac{3L}{4}$ etc ...

- opérateur position

$$\begin{aligned}\hat{x}\Psi_n(x,t) &= x\Psi_n(x,t) \\ &= e^{i\alpha n} \sqrt{\frac{2}{L}} x \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar}\end{aligned}$$

Calculez $\langle \hat{x} \rangle$ et Δx dans l'état $n=1, n=2, n=50$.

- opérateur impulsion

$$\hat{p}\Psi_n(x,t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(\Psi_n(x,t)) = A_n \frac{n\pi}{L} \cos \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar}$$

Calculez $\langle \hat{p} \rangle$ et Δp dans l'état $n=1, n=2, n=50$.

- relation d'incertitude Vérifiez explicitement que $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$ dans les états $n=1, 2, 50$

etc ...

...

V L'opérateur \hat{H}

L'équation de Schrödinger indépendante du temps (Eq.(3.28)) peut s'écrire sous la forme

$$\boxed{\frac{\hat{p}^2}{2m}\phi(x) = E\phi(x)}. \quad (3.36)$$

Les solutions que nous avons construites vérifient les relations

$$\boxed{\frac{\hat{p}^2}{2m}\phi_n(x) = E_n\phi_n(x)}. \quad (3.37)$$

L'équation (3.36) est une *équation aux valeurs propres* et les solutions $\phi_n(x)$ sont des fonctions propres de l'opérateur $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ correspondant aux valeurs propres E_n . Ces notions sont omniprésentes en mécanique quantique et il est essentiel de bien comprendre de quoi il s'agit.

Tout d'abord l'opérateur $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ est une “observable” qui représente l'énergie du système dans le cas particulier qui nous occupe (particule dans un puits infini).

Puisque \hat{p} représente l'observable impulsion, il est naturel que $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ représente l'observable “énergie cinétique”. Dans le cas d'une particule confinée, mais libre, cette observable “énergie cinétique” est également l'observable “énergie du système”. En général on définit l'opérateur \hat{H} (l'hamiltonien) par

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})} \quad (3.38)$$

et l'équation de Schrödinger indépendante du temps (Eq.(3.25)) s'écrit alors

$$\hat{H}\phi = E\phi \quad (3.39)$$

sur une amplitude de Schrödinger $\Psi(x, t)$, nous avons

$$\begin{aligned} \hat{p}\Psi(x, t) &= -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \\ (\hat{p})^2 \Psi(x, t) &= \hat{p}(\hat{p}\Psi(x, t)) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

et

$$\hat{V}(\hat{x})\Psi(x, t) = V(x)\Psi(x, t).$$

Résoudre l'équation de Schrödinger (3.25) est ni plus ni moins que trouver les valeurs propres et les vecteurs propres de \hat{H} . Nous avons (complètement) résolu ce problème pour une particule dans un puits infini (particule libre confinée).

L'équation de Schrödinger (3.1) s'écrit maintenant

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi} \quad (3.40)$$

Dans le cas d'une particule confinée, vérifiez les assertions suivantes (les $\Psi_n(x, t)$ sont données par Eqs.(3.33) et (3.34).

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi_n(x, t)}{\partial t} &= E_n \Psi_n(x, t) \\ \langle \hat{H} \rangle_n &= \int dx \Psi_n^* \hat{H} \Psi_n = E_n \\ (\Delta E_n)^2 &= \int dx \Psi_n^* (\hat{H} - E_n)^2 \Psi_n = 0 \end{aligned}$$

Nous y reviendrons dans le chapitre V.

Chapitre IV

L'équation de Schrödinger : solutions particulières

I Densité et courant de probabilité

Dans le chapitre précédent nous avons défini la densité de probabilité

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2. \quad (4.1)$$

C'est M. Born qui, en 1926, a proposé la définition (4.1) et "l'interprétation probabiliste de la mécanique quantique" qui en découle. Un argument important pour motiver cette interprétation est que la densité de probabilité satisfait une condition de conservation locale qui est formellement analogue à la condition de conservation locale de la densité de charge en électrodynamique. Dans ce dernier cas, toute augmentation ou diminution au cours du temps de la densité de charge électrique dans une région donnée de l'espace est comptabilisée de manière précise en terme d'un courant électrique qui traverse la frontière de cette région. Dans le cas qui nous occupe, la probabilité de trouver une particule dans une "région" de l'espace unidimensionnel (i.e. $x_1 \leq x \leq x_2$) est donnée par

$$\int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (4.2)$$

et le taux de variation de cette probabilité

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \int_{x_1}^{x_2} \left[\frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial t} \Psi(x, t) + \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \right] dx \quad (4.3)$$

et avec l'équation de Schrödinger le membre de droite devient

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{x_1}^{x_2} \left\{ \Psi^*(x, t) \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*(x, t)}{\partial x^2} \Psi(x, t) \right\} dx \quad (4.4)$$

mais comme

$$\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \quad (4.5)$$

l'équation (4.4) devient

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right\} \Big|_{x_1}^{x_2} \quad (4.6)$$

En définissant le *courant de probabilité*

$$J(x, t) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} \Psi(x, t) \right) \quad (4.7)$$

l'équation (4.6) devient

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\Psi(x, t)|^2 dx = J(x_1, t) - J(x_2, t) \quad (4.8)$$

dont l'interprétation physique est évidente : le taux de changement de la probabilité de trouver la particule dans la région $x_1 \leq x \leq x_2$ est précisément donné par la différence du courant de probabilité qui entre en x_1 et du courant de probabilité qui sort en x_2 .

Pour une solution de l'équation de Schrödinger de la forme

$$\Psi(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

le courant de probabilité est *stationnaire*

$$J(x) = -\frac{i\hbar}{2m} \left(\phi^*(x) \frac{d\phi(x)}{dx} - \frac{d\phi^*(x)}{dx} \phi(x) \right) \quad (4.9)$$

et l'équation (4.8) donne à présent

$$J(x_1) = J(x_2). \quad (4.10)$$

Nous reviendrons sur la signification physique de cette relation dans plusieurs des exemples explicites traités dans ce chapitre.

II La particule libre

Pour une particule libre, l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \Psi(x, t)$$

admet des solutions de la forme

$$\Psi(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar}$$

pour toute valeur positive de E . En effet, l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \phi(x) = E \phi(x) \quad \text{soit encore} \quad \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2} \phi(x).$$

En posant

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (4.11)$$

nous obtenons finalement

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = -k^2\phi(x) \quad (4.12)$$

et cette équation admet des solutions du type

$$\phi_1(x) = Ae^{ikx} \quad (4.13)$$

ou encore

$$\phi_2(x) = Be^{-ikx} \quad (4.14)$$

et de telles solutions existent pour toute valeur positive de E . On dira que le “spectre de l’hamiltonien libre” est continu.

Il est important de remarquer que, de la définition de l’opérateur impulsion

$$\hat{p}\phi(x) = -i\hbar\frac{\partial\phi(x)}{\partial x},$$

il résulte que

$$\hat{p}\phi_1(x) = +\hbar k\phi_1(x) \quad \text{et} \quad \hat{p}\phi_2(x) = -\hbar k\phi_2(x). \quad (4.15)$$

L’amplitude de probabilité pour une particule libre est donnée par

$$\Psi_1(x, t) = Ae^{ikx}e^{-iEt/\hbar} \quad (4.16)$$

ou

$$\Psi_2(x, t) = Be^{-ikx}e^{-iEt/\hbar} \quad (4.17)$$

dans les deux cas nous avons des *états propres de l’impulsion*. Les valeurs propres de l’impulsion sont respectivement $\pm\hbar k$.

Il est commode de poser $p = \hbar k$ et les équations (4.16) et (4.17) s’écrivent alors

$$\Psi_1(x, t) = Ae^{i(px-Et)/\hbar} \quad (4.18)$$

$$\Psi_2(x, t) = Be^{-i(px+Et)/\hbar} \quad (4.19)$$

et il s’agit bien entendu d’*ondes planes* !!

La densité et le courant de probabilité se calculent aisément pour les états $\Psi_1(x, t)$ et $\Psi_2(x, t)$

$$P_1(x, t) = |\Psi_1(x, t)|^2 = |A|^2 \quad P_2(x, t) = |\Psi_2(x, t)|^2 = |B|^2$$

$$J_1(x, t) = \frac{p}{m}|A|^2 \quad J_2(x, t) = \frac{-p}{m}|B|^2$$

Il en résulte que les amplitudes de probabilités $\Psi_1(x, t)$ et $\Psi_2(x, t)$ ne sont pas *normalisables* sur tout l'axe réel, c'est-à-dire

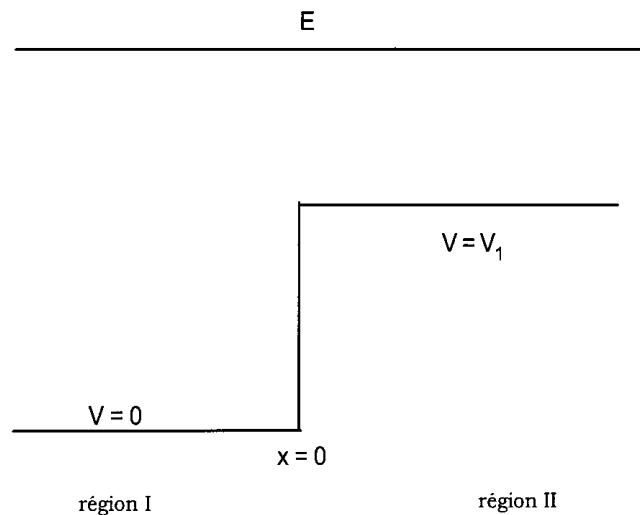
$$\int_{-\infty}^{+\infty} P_1(x, t) dx$$

diverge et il en va de même pour $P_2(x, t)$. Il y a diverses manières de traiter ce problème de normalisation et nous y reviendrons dans les chapitres suivants. Une approche évidente est de considérer une onde plane comme une “idéalisation” et d'utiliser, comme dans tous les problèmes d'ondes, des “paquets d'onde” qui eux sont normalisables.

Dans ce chapitre nous allons continuer à utiliser (4.18) et (4.19), mais dans le sens d'une “modélisation d'un processus de diffusion” (à une dimension). Dans cette optique, les états (4.18) et (4.19) restent des états propres de l'impulsion, de valeurs propres $\pm p = \pm \hbar k$. Même si ces états ne sont pas “normalisables” nous les interprétons comme amplitudes de probabilité correspondant à un “faisceau de particules” et densité uniforme ($|A|^2$ particule, par unité de longueur pour l'équation (4.18)) et d'impulsion p (pour (4.18)) ou $-p$ (pour (4.19)). La situation physique que nous modélisons ainsi est celle d'un grand nombre de particules mono-énergétiques produites par un accélérateur et que nous envoyons sur une “cible” qui sera représentée par un “potentiel”.

III Le “saut” de potentiel

Comme premier exemple nous considérons la diffusion par un “saut de potentiel” (encore appelé “potentiel en escalier”) d'un faisceau de particules d'énergie E (voir figure ci-dessous) :



Nous commençons par considérer le cas $E > V_1$. Et pour préciser univoquement les conditions du problème, nous considérons le cas où "il n'y a pas de particules qui viennent de la droite". Nous prenons $x = 0$ comme la position de la marche d'escalier et V_1 comme hauteur de la marche. Nous résolvons l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V\right)\phi(x) = E\phi(x).$$

Dans la région I ($x < 0$), l'équation à résoudre est

$$\frac{d^2\phi_I(x)}{dx^2} = -k^2\phi_I(x) \quad (4.20)$$

avec

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (4.21)$$

tandis que dans la région II ($x > 0$) nous avons

$$\frac{d^2\phi_{II}(x)}{dx^2} = -k_1^2\phi_{II}(x) \quad (4.22)$$

avec, maintenant

$$k_1^2 = \frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}. \quad (4.23)$$

En $x = 0$, nous imposons la continuité de $\phi(x)$ et de sa dérivée première $\frac{d\phi}{dx}$, à savoir

$$\Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \quad (4.24)$$

$$\left.\frac{d\Phi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\Phi_{II}}{dx}\right|_{x=0}. \quad (4.25)$$

Remarquons que ces conditions mathématiques sont indispensables si nous voulons donner un sens à la densité et au courant de probabilité définis dans le § 1.

Dans la région II, la solution générale de l'équation (4.22) est donnée par

$$\phi_{II} = Ce^{ik_1x} + De^{-ik_1x} \quad (4.26)$$

mais la condition physique "il n'y a pas de particules qui viennent de la droite" impose

$$D = 0 \quad (4.27)$$

Dans la région I la solution générale de l'équation (4.20) est évidemment

$$\phi_I(x) = A_0e^{ikx} + B e^{-ikx}. \quad (4.28)$$

Les conditions de continuité (4.24) et (4.25) donnent

$$A_0 + B = C$$

$$ik(A_0 - B) = ik_1C$$

soit encore

$$B = \frac{k - k_1}{k + k_1} A_0 \quad (4.29)$$

et

$$C = \frac{2k}{k + k_1} A_0 \quad (4.30)$$

et le problème est complètement résolu ! Pour comprendre physiquement ce qui se passe il est utile de définir un coefficient de réflexion R et un coefficient de transmission T de la manière suivante :

$$R + T = 1 \quad (4.31)$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A_0|^2} = \frac{(k - k_1)^2}{(k + k_1)^2} \quad (4.32)$$

$$T = 1 - R = \frac{k_1 |C|^2}{k |A_0|^2} = \frac{4kk_1}{(k + k_1)^2} \quad (4.33)$$

La description physique est à présent immédiate : nous sommes partis avec un faisceau de particules “venant de la gauche”. Lorsque ce faisceau arrive à la “marche d’escalier” une partie est “réfléchie” et une autre passe dans la région II i.e. est transmise. Le faisceau venant de la gauche est composé de particules d’impulsion $\hbar k$ et est décrit par le terme $A_0 e^{ikx}$. La densité de probabilité est uniforme $|A_0|^2$ et le courant de probabilité $J_{\text{incident}} = \frac{p}{m} |A_0|^2 = \frac{\hbar k}{m} |A_0|^2$. Les particules “réfléchies par le saut de potentiel” ont une impulsion $-\hbar k$ (elles vont de droite à gauche dans la région I). Elles sont décrites par le terme $B e^{-ikx}$: leur densité de probabilité est également uniforme $|B|^2$ et le courant de probabilité

$$|J_{\text{réf}}| = \left| -\frac{p}{m} |B|^2 \right| = \frac{\hbar k}{m} |B|^2.$$

Les particules “transmises dans la région II”, ont quant à elles une impulsion $+\hbar k_1$. Leur densité de probabilité est également uniforme $|C|^2$ et le courant de probabilité $J_{\text{transmis}} = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2$. La signification des coefficients de réflexion et de transmission est également claire

$$\begin{aligned} R &= \frac{J_{\text{réflexion}}}{J_{\text{incident}}} = \frac{|B|^2}{|A_0|^2} \\ T &= \frac{J_{\text{transmis}}}{J_{\text{incident}}} = \frac{k_1 |C|^2}{k |A_0|^2} \end{aligned}$$

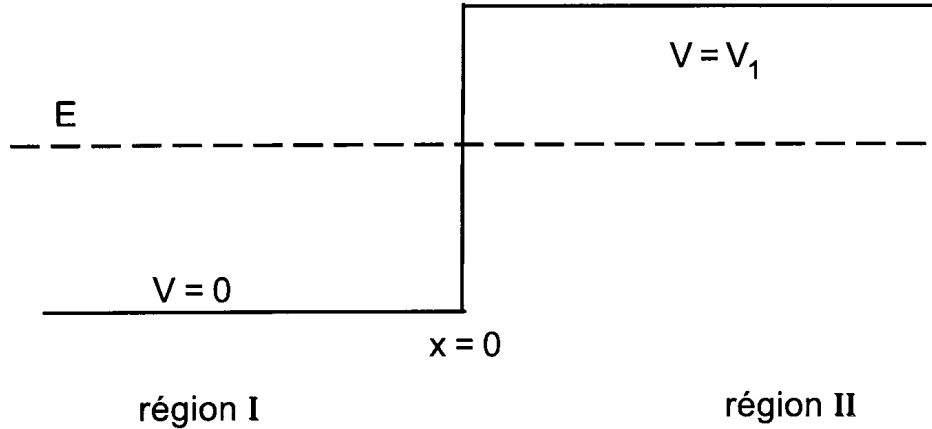
La simplicité de la solution ne doit pas occulter le fait que le comportement d’un faisceau de particules quantiques est radicalement différent de celui d’un faisceau de particules classiques : dans ce dernier cas il n’y aurait tout simplement pas de “réflexion au saut du potentiel” : le faisceau passerait intégralement de la région I vers la région II.

Il n'y a aucune difficulté à résoudre le problème de la diffusion d'un faisceau de particules venant de la droite

$$\begin{aligned} \text{dans la région I } (x < 0) \quad & \phi_I(x) = \tilde{B}e^{-ikx} \\ \text{dans la région II } (x > 0) \quad & \phi_{II}(x) = \tilde{C}e^{ik_1x} + D_0e^{-ik_1x} \end{aligned}$$

et la suite du calcul est élémentaire.

Nous considérons à présent le cas $E < V_1$, à savoir



dans la région I nous avons toujours

$$\frac{d^2 \phi_I(x)}{dx^2} = -k_0^2 \phi_I(x) \quad (4.34)$$

où

$$k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (4.35)$$

tandis que dans la région II, nous avons maintenant

$$\frac{d^2 \phi_{II}(x)}{dx^2} = +\kappa^2 \phi_{II}(x) \quad (4.36)$$

où

$$\kappa^2 = \frac{2m(V - E)}{\hbar^2} > 0 \quad (4.37)$$

La solution générale de (4.34) est toujours

$$\phi_I(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x} \quad (4.38)$$

tandis que pour (4.36) nous avons

$$\phi_{II}(x) = Ce^{-\kappa x} + De^{\kappa x}. \quad (4.39)$$

La consistance physique impose $D = 0$ sinon la densité de probabilité correspondante serait dominée par le terme $|D|^2 e^{2\kappa x}$, qui est exponentiellement croissant : avec un tel terme la

probabilité relative de trouver la particule “loin sous la barrière” (c'est-à-dire $x \gg 0$) serait énorme et ceci ne correspond pas du tout à la situation physique envisagée.

Les conditions de continuité en $x = 0$ sont données par

$$A + B = C \quad (4.40)$$

$$ik_0(A - B) = -kC \quad (4.41)$$

et la solution de ces équations est donnée par

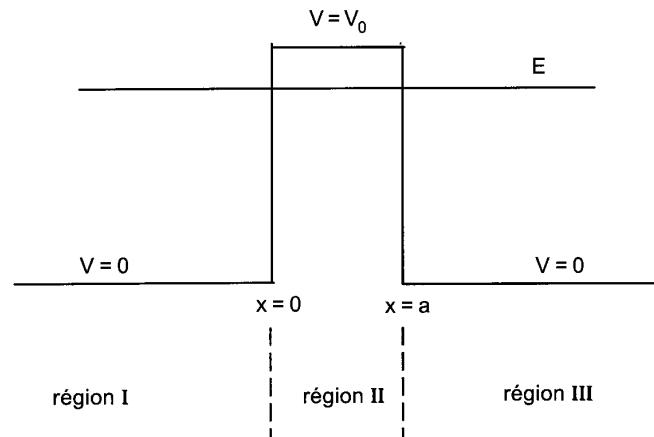
$$\frac{B}{A} = \frac{ik_0 + \kappa}{ik_0 - \kappa} \quad \frac{C}{A} = \frac{2ik_0}{ik_0 - \kappa}.$$

Le résultat important est que $C \neq 0$: il y a une probabilité non nulle de trouver une particule quantique dans une région absolument interdite à une particule classique (elle y aurait une énergie cinétique négative). Dans le paragraphe suivant nous donnerons une illustration spectaculaire de cet effet quantique à savoir l'effet tunnel.

En attendant, il est bon de résumer ce que nous avons appris dans ce paragraphe : pour toute valeur de $E > 0$ nous avons trouvé des solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps. Le spectre de \hat{H} est donc continu. Au passage nous avons identifié deux effets physiques typiquement quantiques. D'une part une particule quantique rebondit sur une barrière de potentiel même lorsque son énergie est supérieure à celle de la barrière et d'autre part une particule quantique peut pénétrer dans des régions absolument inaccessibles à une particule classique.

IV Barrière de potentiel et “effet tunnel”

Considérons à présent la “diffusion d'un faisceau de particules” venant de la gauche par une barrière de potentiel



Nous commençons par le cas $E < V_0$. Dans la région I ($x \leq 0$), la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps s'écrit comme précédemment

$$x \leq 0 \quad \phi_I(x) = A_0 e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad (4.42)$$

tandis que dans la région III, nous prenons

$$x \geq a \quad \phi_{III}(x) = E e^{ikx}. \quad (4.43)$$

Dans les expressions (4.42) et (4.43) $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$. Dans la région III nous avons annulé le coefficient d'un terme de la forme $F_0 e^{-ikx}$ pour des raisons physiques que nous avons déjà énoncées dans le paragraphe précédent : la "diffusion" que nous décrivons est celle d'un faisceau de particules d'impulsion $\hbar k$ venant de la gauche et qui frappe la barrière de potentiel en $x = 0$. Bien entendu, on pourrait tout aussi bien décrire la diffusion d'un faisceau de particules d'impulsion $\hbar k$ venant de la droite et frappant la barrière de potentiel en $x = a$ dans ce cas on prendrait évidemment dans les régions III et I

$$x \geq a \quad \phi_{III}(x) = E e^{ikx} + F_0 e^{-ikx}$$

et

$$x \leq 0 \quad \phi_I(x) = B e^{-ikx}$$

au lieu des expressions (4.42) et (4.43).

Dans la région II $0 \leq x \leq a$, l'équation à résoudre est

$$\frac{d^2 \phi_{II}(x)}{dx^2} = \kappa^2 \phi_{II}(x) \quad (4.44)$$

avec $\kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$.

La solution générale de l'équation (4.44) est donnée par

$$0 \leq x \leq a \quad \phi_{II}(x) = C e^{-\kappa x} + D e^{\kappa x}. \quad (4.45)$$

Cette solution mérite quelques commentaires : dans le paragraphe précédent nous avons exclus l'exponentielle croissante (i.e. nous avons imposé la condition $D = 0$) parce que, avec un tel terme, la probabilité (relative) de trouver la particule au point x croît (exponentiellement) avec x ce qui était physiquement inacceptable dans le problème considéré.

Ici, par contre, la barrière de potentiel étant de largeur a , finie, il n'y a plus aucune raison d'exclure a priori l'une ou l'autre des exponentielles.

Bref, revenons aux équations (4.42), (4.43) et (4.44) et imposons les conditions de continuité sur ϕ et $\frac{d\phi}{dx}$ en $x = 0$ et en $x = a$. Explicitement, en $x = 0$

$$\phi_I(0) = \phi_{II}(0) \quad \text{soit} \quad A_0 + B = C + D \quad (4.46)$$

$$\frac{d\phi_I(0)}{dx} = \frac{d\phi_{II}(0)}{dx} \quad \text{soit} \quad ik(A_0 - B) = \kappa(D - C) \quad (4.47)$$

et en $x = a$

$$\phi_{II}(a) = \phi_{III}(a) \quad \text{soit} \quad Ce^{-\kappa a} + De^{\kappa a} = Ee^{ika} \quad (4.48)$$

$$\frac{d\phi_{II}(a)}{dx} = \frac{d\phi_{III}(a)}{dx} \quad \text{soit} \quad -\kappa Ce^{-\kappa a} + \kappa De^{\kappa a} = ikEe^{ika}. \quad (4.49)$$

Il n'y a aucune difficulté à résoudre les équations (4.46) à (4.49) et la résolution explicite est laissée à titre d'exercice. Le coefficient qui nous intéresse ici est E et on trouve facilement que

$$4ik\kappa A_0 = \left\{ (\kappa + ik)^2 e^{-\kappa a} - (\kappa - ik)^2 e^{\kappa a} \right\} E e^{ika}. \quad (4.50)$$

Le “coefficient de transmission” (encore appelé pénétrabilité)

$$T = \left| \frac{E}{A_0} \right|^2 \quad (4.51)$$

est donc non nul : c'est l'effet tunnel !

Dans le cas où $\kappa a \gg 1$ il est aisé d'obtenir une expression approchée de ce coefficient de transmission, à savoir

$$T \approx \frac{16k^2\kappa^2}{(\kappa^2 + k^2)^2} e^{-2\kappa a} \quad \kappa a \gg 1$$

soit encore

$$T \approx 16 \left(\frac{E}{V_0} \right) \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) e^{-2\kappa a} \quad \kappa a \gg 1$$

qui permet de calculer très simplement T dans des exemples “concrets”.

L'effet tunnel est au même titre que la “quantification de l'énergie” une prédiction spectaculaire de la mécanique quantique. Classiquement, un tel effet est absolument impossible du point de vue énergétique : une particule classique d'énergie E ne peut jamais “traverser” une barrière de potentiel dont la hauteur est supérieure à E .

Il y a de multiples exemples et applications de l'effet tunnel en physique de l'état solide, en physique nucléaire (désintégration α) etc ... Nous n'avons pas encore développé les outils

nécessaires pour illustrer dans une situation réaliste ces “effets tunnels”, mais si le temps le permet, nous y reviendrons.

La “physique” sous-jacente à l’effet tunnel devient tout à fait évidente en terme de courant de probabilité. Dans la région I le courant de probabilité est explicitement donné par

$$J_I = \frac{\hbar k}{m} |A_0|^2 - \frac{\hbar k}{m} |B|^2 \quad (4.52)$$

et, comme expliqué précédemment, cette expression de J_I est précisément la différence de deux “flux” : le flux incident $\frac{\hbar k}{m} |A_0|^2$ et le flux réfléchi par la barrière $-\frac{\hbar k}{m} |B|^2$.

Dans la région III, nous avons de même

$$J_{III} = \frac{\hbar k}{m} |E|^2. \quad (4.53)$$

Pour les “états stationnaires” considérés jusqu’ici (une seule valeur de E) la continuité du courant de probabilité (les particules ne disparaissent pas !) implique

$$J_I = J_{III} \quad (4.54)$$

et cette conservation du courant de probabilité est automatiquement garantie pour les valeurs de B et E calculées à partir des conditions de continuité Eqs. (4.46 - 4.49). Vérifiez-le !

Dès lors, il doit y avoir un courant de probabilité qui traverse la région II : c’est l’effet tunnel.

A partir de l’équation (4.45) on trouve en effet

$$J_{II} = \frac{-i\hbar\kappa}{m} (C^* D - C D^*) \quad (4.55)$$

et $J_I = J_{II} = J_{III}$ (en utilisant de nouveau les Eqs. (4.46) - (4.49)) comme prévu.

Il faut encore remarquer que C et D doivent être non nuls et avoir des phases différentes pour que $J_{II} \neq 0$.

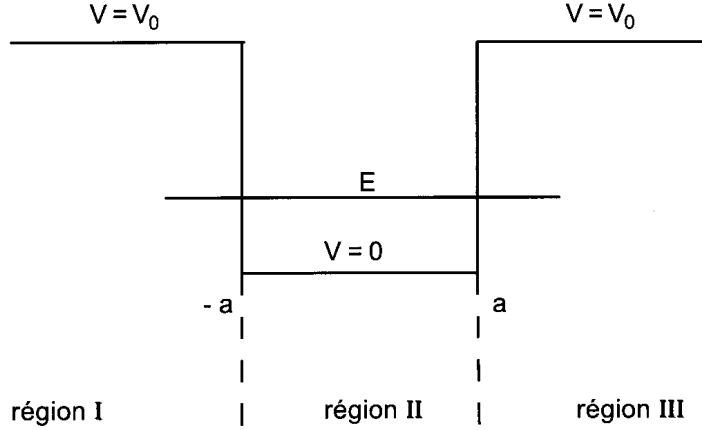
Pour terminer le problème de la barrière de potentiel, il faudrait encore discuter les cas où $E > V_0$. Il n’y a aucune difficulté à résoudre ce problème : pour chaque valeur de E , il existe des solutions et leur interprétation physique ne pose aucune difficulté !

V Le puits de potentiel

Considérons à présent le “puits de potentiel” représenté ci-dessous

This document is available free of charge on





Nous allons voir que ce problème admet des solutions pour toutes les énergies $E > V_0$. Pour $E < V_0$, les solutions seront de “carré sommable” : les amplitudes de probabilité sont “localisées” et les états correspondants sont des “états liés” mais l’équation de Schrödinger n’admettra des solutions que pour certaines valeurs discrètes de E : une fois encore l’énergie est quantifiée ! Pour toute énergie $E > V_0$, la solution de l’équation de Schrödinger ne sera pas de carré sommable, et comme précédemment nous l’appellerons un “état de diffusion”. Le puits de potentiel est donc un exemple simple d’un opérateur \hat{H} dont le spectre a une partie discrète (correspondant aux valeurs de l’énergie des états liés) et une partie continue (les états de diffusion).

Commençons par résoudre le problème des états liés $E < V_0$.

Dans la région I

$$\phi_I(x) = Ae^{\kappa x} \quad x \leq -a \quad (4.56)$$

dans la région II

$$\phi_{II} = B \sin kx + C \cos kx \quad -a \leq x \leq a \quad (4.57)$$

et enfin dans la région III

$$\phi_{III}(x) = De^{-\kappa x} \quad x \geq a \quad (4.58)$$

avec

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \kappa^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Répetons une fois encore que pour des raisons physiques nous avons exclu un terme $e^{-\kappa x}$ dans la région I et un terme $e^{\kappa x}$ dans la région III : nous cherchons des solutions “localisées dans la boîte”. Les conditions de continuité de $\phi(x)$ et $\frac{d\phi}{dx}$ aux points $x = \pm a$ donnent les équations

$$De^{-\kappa a} = B \sin ka + C \cos ka \quad (4.59)$$

$$-\kappa De^{-\kappa a} = kB \cos ka - kC \sin ka \quad (4.60)$$

$$Ae^{-\kappa a} = -B \sin ka + C \cos ka \quad (4.61)$$

$$\kappa Ae^{-\kappa a} = kB \cos ka + kC \sin ka \quad (4.62)$$

Ces équations sont linéaires et homogènes dans les inconnues A, B, C, D . En général un tel système n'admet qu'une solution triviale ($A = B = C = D = 0$). Pour obtenir une solution non triviale il faut que le déterminant soit nul ou encore que les équations ne soient pas linéairement indépendantes c'est-à-dire satisfassent une "condition de consistance". Il est aisé de dériver cette condition de la manière suivante : le rapport de (4.59) et (4.61) donne

$$\frac{D}{A} = \frac{B \operatorname{tg} ka + C}{-B \operatorname{tg} ka + C} \quad (4.63)$$

tandis que le rapport des Eqs. (4.60) et (4.62)

$$\frac{D}{A} = \frac{C \operatorname{tg} ka - B}{C \operatorname{tg} ka + B}. \quad (4.64)$$

Egalant (4.63) et (4.64), un peu d'algèbre donne finalement

$$(\operatorname{tg}^2 ka + 1)BC = 0.$$

Il n'y a que deux solutions à cette équation : $B = 0$ ou $C = 0$. Dans ces cas-là et uniquement dans ces cas-là, les Eqs. (4.59) à (4.62) admettront des solutions non triviales.

1er cas $B = 0$

Dans ce cas $D = A$ et nous voyons, par substitution dans les Eqs. (4.56) - (4.58) que l'amplitude de probabilité $\phi(x)$ est une fonction paire $\phi(-x) = \phi(x)$.

2ème cas $C = 0$

Dans ce cas $D = -A$ et l'amplitude de probabilité est une fonction impaire $\phi(-x) = -\phi(x)$.

Il n'y a aucune difficulté à résoudre les conditions de continuité Eqs. (4.59) - (4.62) dans les deux cas précités et on trouve

1er cas (solutions paires) : Les Eqs. (4.59) - (4.62) ont une solution non triviale si et seulement si

$$\tan ka = \frac{\kappa}{k} \quad (4.65)$$

2ème cas (solutions impaires) : Il existe des solutions non triviales pourvu que

$$\cotan ka = -\frac{\kappa}{k}. \quad (4.66)$$

Dans les Eqs. (4.65) et (4.66) k et κ sont des fonctions de l'énergie E . Les solutions de ces équations donnent les *valeurs de E* pour lesquelles l'équation de Schrödinger admet une solution.

Explicitement, nous avons

soit

$$\tan \left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a \right) = \left(\frac{V_0 - E}{E} a \right)^{1/2} = \left(\frac{V_0}{E} - 1 \right)^{1/2} \quad (4.67)$$

soit

$$\cotan \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} a \right) = - \left(\frac{V_0}{E} - 1 \right)^{1/2} \quad (4.68)$$

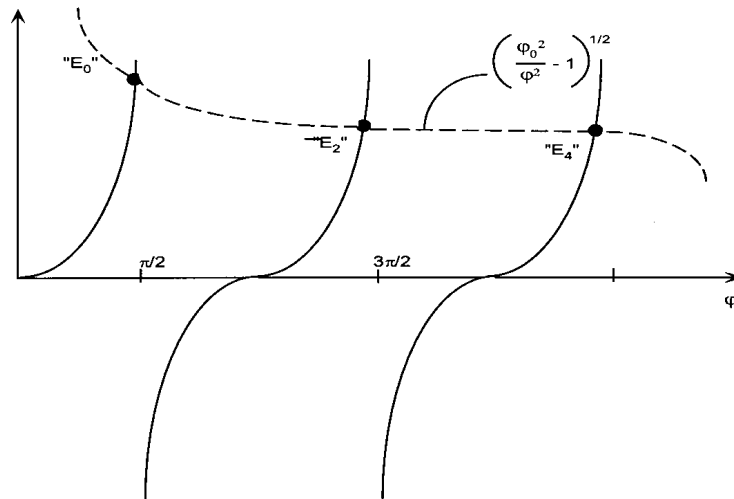
Les Eqs. (4.67) et (4.68) sont des équations transcendentes, mais il est aisé de les résoudre graphiquement. Posons $\varphi = \frac{\sqrt{2mE}a}{\hbar}$ et $\varphi_0 = \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\hbar}$; dès lors nous avons à résoudre

1er cas $\tan \varphi = \left(\frac{\varphi_0^2}{\varphi^2} - 1 \right)^{1/2}$

2ème cas $\cotan \varphi = - \left(\frac{\varphi_0^2}{\varphi^2} - 1 \right)^{1/2}.$

Soit, graphiquement

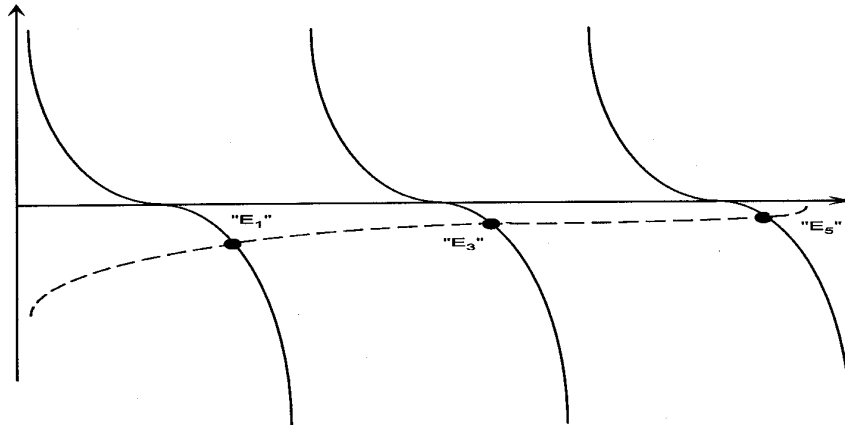
1er cas (solutions paires)



à partir des valeurs de φ correspondant aux points d'intersection des deux courbes,

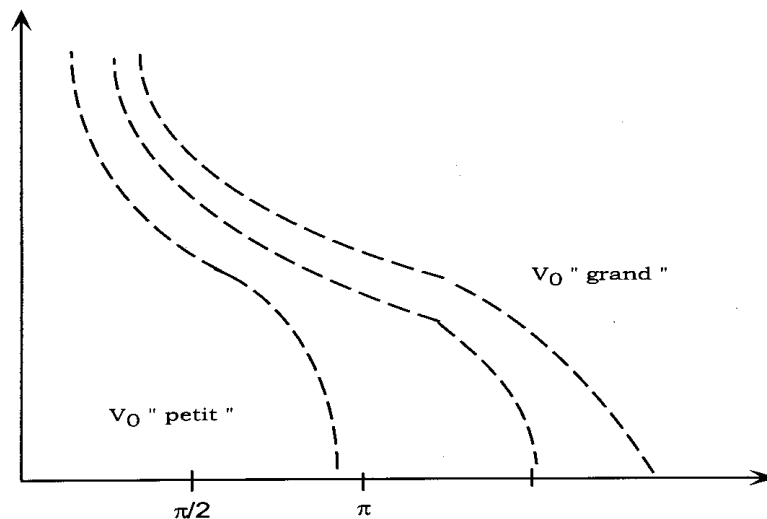
$\tan \varphi$ et $\left(\frac{\varphi_0^2}{\varphi^2} - 1 \right)^{1/2}$ nous pouvons calculer les énergies $E_0, E_2, E_4, E_6 \dots$

2ème cas (solutions impaires)



nous obtenons de même les énergies E_1, E_3, E_5, \dots

Il est également instructif de représenter la fonction $\left(\frac{V_0}{E} - 1\right)^{1/2}$ pour différentes valeurs de V_0 .



Plusieurs résultats importants découlent de l'analyse qui précède :

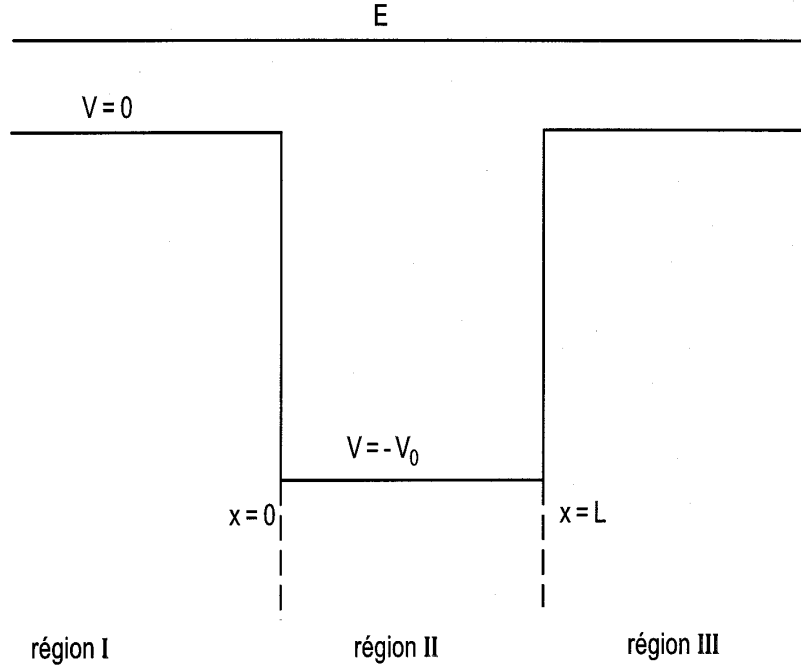
- L'énergie est "quantifiée" et les valeurs discrètes de E pour lesquelles l'équation de Schrödinger admet une solution définissent le *spectre discret de l'opérateur \hat{H}* . Ce spectre est donné par un nombre fini de valeurs de E , à savoir

$$E_0 < E_1 < E_2 < E_3 < \dots$$

- Aussi petite que soit la valeur de V_0 , il existe toujours au moins une solution paire : il y a toujours au moins un état lié dans un puits de potentiel à une dimension.

Exercice : donner la condition pour avoir un seul état lié.

Le cas $E > V_0$ ne présente aucune difficulté. Pour la facilité des calculs nous “changeons” de notation, i.e. nous prenons la margelle du puits comme zéro de l'énergie et nous changeons l'origine des coordonnées



Et, en répétant quasi mot à mot la procédure du paragraphe précédent nous obtenons, à partir de

$$\begin{aligned}
 \text{région I} : \quad \phi_I(x) &= A_0 e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & x \leq 0 \\
 \text{région II} : \quad \phi_{II}(x) &= C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x} & L \geq x \geq 0 \\
 \text{région III} : \quad \phi_{III}(x) &= F e^{+ik_1 x} & x \geq L
 \end{aligned}$$

avec

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad k_2^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}.$$

Les conditions de continuité deviennent

$$A_0 + B = C + D \quad (4.69)$$

$$ik_1(A_0 - B) = ik_2(C - D) \quad (4.70)$$

$$C e^{ik_2 L} + D e^{-ik_2 L} = F e^{+ik_1 L} \quad (4.71)$$

$$ik_2 C e^{ik_2 L} - ik_2 D e^{-ik_2 L} = ik_1 F e^{+ik_1 L} \quad (4.72)$$

Il n'y a aucune difficulté à résoudre ces équations c'est-à-dire à exprimer les coefficients B, C, D, F en terme de A_0 . Nous nous bornons ici au calcul du coefficient de transmission

$$T = \frac{k_1 |F|^2}{k_1 |A_0|^2} = \frac{|F|^2}{|A_0|^2}$$

Des équations (4.69) et (4.70) on tire

$$2k_1 A_0 = (k_1 + k_2)C + (k_1 - k_2)D \quad (4.73)$$

tandis que les Eqs. (4.71) et (4.72) donnent

$$2k_2 C e^{ik_2 L} = F(k_2 + k_1) e^{ik_1 L}$$

et

$$2k_2 D e^{-ik_2 L} = F(k_2 - k_1) e^{ik_1 L}$$

en substituant ces deux dernières expressions dans l'équation (4.73) on obtient

$$4k_1 k_2 A_0 = \left((k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 L} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 L} \right) F e^{ik_1 L}$$

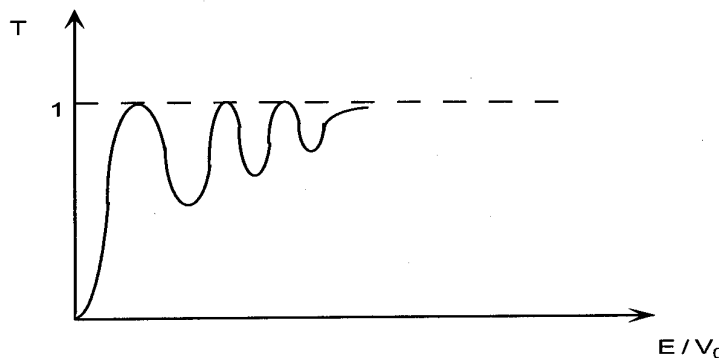
et dès lors

$$T = \frac{|F|^2}{|A_0|^2} = \frac{16k_1^2 k_2^2}{|(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 L} - (k_2 - k_1)^2 e^{ik_2 L}|^2} \quad (4.74)$$

Il est intéressant d'examiner les variations de ce coefficient de transmission en fonction des paramètres du problème :

- a) dans le cas où l'énergie $E \gg V_0$. Dans ces conditions $k_2 \approx k_1$ et dès lors $T \simeq 1$
- b) lorsque l'énergie incidente est très petite par rapport à la profondeur du puits $E \ll V_0$, nous avons $k_1 \ll k_2$ et $T \simeq \frac{4k_1^2}{k_2^2 \sin^2 kL}$ avec $k_1 \sim \sqrt{E}$ et k_2 approximativement constant en fonction de E cette formule implique $T \simeq E$ i.e. le coefficient de transmission croît linéairement en E dans cette région
- c) pour les énergies données par $k_2 L = n\pi$.

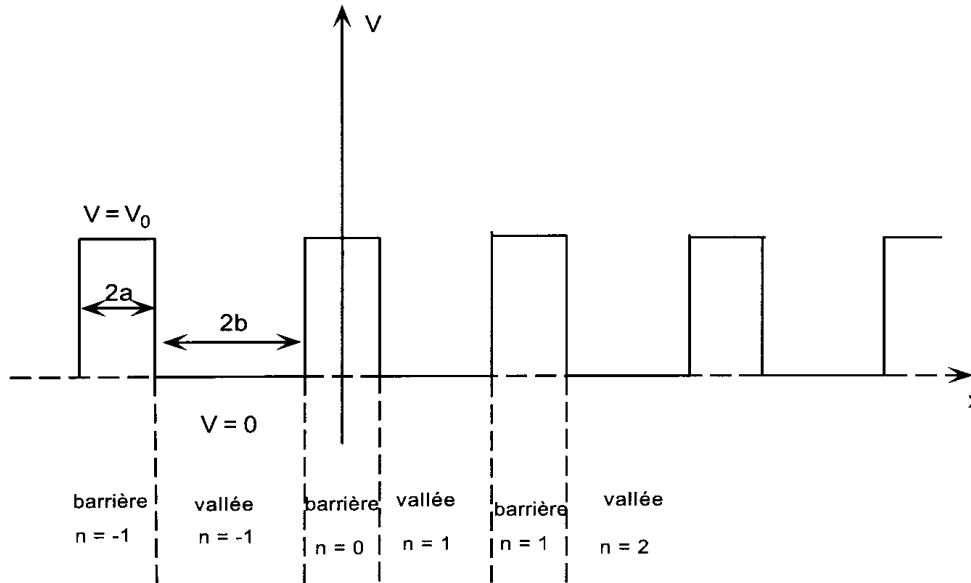
Nous avons $e^{ik_2 L} = e^{-ik_2 L} = +1$ pour n pair et $e^{ik_2 L} = e^{-ik_2 L} = -1$ pour n impair et dès lors $T = 1$. En résumé la courbe de T en fonction de l'énergie incidente à la forme suivante :



Il y a plusieurs phénomènes physiques intéressants associés aux maxima de T . Un est le phénomène de “résonance” qui dépasse le cadre de ce cours. L'autre est lié à la notion de “transparence d'une cible à un faisceau incident”. $T = 1$ encode bien cette notion : le faisceau initial est intégralement transmis, comme si la cible n'était pas là. Cet effet de transparence est observé dans la diffusion d'électrons par des atomes d'argon où il est connu sous le nom d'effet Ramsauer Townsend (minimum dans la section efficace correspondante).

VI Potentiel périodique

Considérons à présent le cas d'un potentiel *périodique* consistant en une succession de vallées et de plateaux



$\ell = 2a + 2b$ est appelé la période du potentiel $V(x) = V(x + 2\ell)$. Le potentiel ci-dessus constitue un modèle grossier du potentiel auquel est soumis un électron dans un réseau cristallin (solide).

Dans la $n^{\text{ième}}$ vallée du potentiel, $n\ell + a - \ell \leq x \leq n\ell - a$, la solution de l'équation de Schrödinger peut s'écrire

$$\Phi_V^{(n)} = A_n e^{ik(x-n\ell)} + B_n e^{-ik(x-n\ell)} \quad (4.75)$$

Pour passer d'une vallée à la suivante, il faut distinguer les cas où $E < V_0$ (suite d'effets tunnels) des cas où $E > V_0$. Nous esquissons les calculs dans le premier cas. Outre l'équation (4.75), nous avons comme solution de l'équation de Schrödinger sous la $N^{\text{ième}}$ barrière ($\kappa^2 =$

$$\left. \frac{2m(V_0-E)}{\hbar} \right) \phi_B^{(N)} = Ce^{-\kappa(x-N\ell)} + De^{\kappa(x-N\ell)} \quad -a \leq x - N\ell \leq a \quad (4.76)$$

tandis que dans la $(n+1)$ ème vallée nous avons

$$\phi_V^{(n+1)} = A_{n+1}e^{ik(x-(n+1)\ell)} + B_{n+1}e^{-ik(x-(n+1)\ell)} \quad a \leq x - n\ell \leq \ell - a \quad (4.77)$$

Pour des raisons physiques nous ne prenons pas $A_n = 0$ ni $B_{n+1} = 0$ (les électrons peuvent passer d'une vallée à l'autre vers la gauche ou vers la droite : il ne s'agit pas de la diffusion d'un faisceau qui vient de la gauche ou de la droite !

Les conditions de continuité en $x - N\ell = -a$ et $x - n\ell = +a$ nous permettent d'exprimer A_{n+1} et B_{n+1} en termes de A_n et B_n . En $x - n\ell = -a$, nous avons

$$\begin{aligned} A_n e^{-ika} + B_n e^{ika} &= C e^{\kappa a} + D e^{-\kappa a} \\ ik A_n e^{-ika} - ik B_n e^{ika} &= -\kappa C e^{\kappa a} + \kappa D e^{-\kappa a} \end{aligned}$$

dont la solution peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} 2\kappa C e^{\kappa a} &= (\kappa - ik)e^{-ika} A_n + (\kappa + ik)e^{ika} B_n \\ 2\kappa D e^{-\kappa a} &= (\kappa + ik)e^{-ika} A_n + (\kappa - ik)e^{ika} B_n \end{aligned}$$

soit encore

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (4.78)$$

où \mathcal{M} est une matrice 2×2 avec $\mathcal{M}_{11} = \frac{(\kappa - ik)e^{-ika}e^{\kappa a}}{2\kappa}$ etc ...

De même les conditions de continuité en $x - n\ell = a$

$$\begin{aligned} C e^{-\kappa a} + D e^{\kappa a} &= A_{n+1} e^{ika} e^{-ik\ell} + B_{n+1} e^{ik\ell} e^{-ika} \\ -\kappa C e^{-\kappa a} + \kappa D e^{\kappa a} &= ik A_{n+1} e^{ika} e^{-ik\ell} - ik B_{n+1} e^{ik\ell} e^{-ika} \end{aligned}$$

dont on tire

$$2ik A_{n+1} e^{ika} e^{-ik\ell} = (ik - \kappa) C e^{-\kappa a} + (ik + \kappa) D e^{\kappa a}$$

et

$$2ik B_{n+1} e^{ik\ell} e^{-ika} = (ik + \kappa) C e^{-\kappa a} + (ik - \kappa) D e^{\kappa a}$$

soit encore

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{N} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} \quad (4.79)$$

où, à nouveau, \mathcal{N} est une matrice 2×2 avec p.ex.

$$\mathcal{N}_{11} = \frac{(ik - \kappa)e^{-\kappa a}e^{-ika}e^{ik\ell}}{2ik} \quad \text{etc} \dots$$

En combinant les équations (4.78) et (4.79) nous avons finalement

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \mathcal{P} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (4.80)$$

où $\mathcal{P} = \mathcal{N}\mathcal{M}$ est une matrice 2×2 qui ne *dépend pas* de n . Nous pouvons donc itérer l'équation (4.80) et écrire, par exemple :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \mathcal{P}^n \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (4.81)$$

Résoudre l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique infini revient à imposer que les limites de \mathcal{P}^n existent pour $n \rightarrow \pm\infty$.

Pour continuer la discussion il est utile de considérer le problème sous l'angle des "valeurs propres" de la matrice \mathcal{P} . Ces valeurs propres sont solutions de l'équation caractéristique :

$$\det |\mathcal{P} - \lambda \mathbf{1}| = 0$$

soit

$$\lambda^2 - \lambda \operatorname{tr} \mathcal{P} + \det \mathcal{P} = 0$$

ou $\operatorname{tr} \mathcal{P} = \mathcal{P}_{11} + \mathcal{P}_{22}$ et $\det \mathcal{P} = \mathcal{P}_{11}\mathcal{P}_{22} - \mathcal{P}_{12}\mathcal{P}_{21}$. Dans le cas qui nous occupe $\det \mathcal{P} = 1$ et $\operatorname{tr} \mathcal{P}$ est réel !! et les solutions de l'équation caractéristique sont donc

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}[\operatorname{tr} \mathcal{P} \pm \sqrt{(\operatorname{tr} \mathcal{P})^2 - 4}] \quad (4.82)$$

si $\operatorname{tr} \mathcal{P} \neq 2$, ces solutions sont distinctes et les vecteurs propres correspondants sont linéairement indépendants. Nous obtiendrons deux solutions linéairement indépendantes de l'équation de

Schrödinger en identifiant $\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$ à un de ces vecteurs propres $= \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_0^+ \\ B_0^+ \end{pmatrix}$

ou $\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_0^- \\ B_0^- \end{pmatrix}$.

En effet

$$\mathcal{P} \begin{pmatrix} A_0^{\pm} \\ B_0^{\pm} \end{pmatrix} = \lambda_{\pm} \begin{pmatrix} A_0^{\pm} \\ B_0^{\pm} \end{pmatrix} \quad (4.83)$$

et par conséquent

$$\mathcal{P}^n \begin{pmatrix} A_0^{\pm} \\ B_0^{\pm} \end{pmatrix} = (\lambda_{\pm})^n \begin{pmatrix} A_0^{\pm} \\ B_0^{\pm} \end{pmatrix} \quad (4.84)$$

Si $|\text{tr } \mathcal{P}| > 2$, λ_+ et λ_- sont *réels* et dès lors soit la limite $n \rightarrow \infty$ soit la limite $n \rightarrow -\infty$ va diverger et ceci est en conflit avec la condition physique d'une amplitude de probabilité finie. Par conséquent, nous aurons des solutions acceptables si et seulement si

$$|\text{tr } \mathcal{P}| = |\mathcal{P}_{11} + \mathcal{P}_{22}| \leq 2 \quad (4.85)$$

Sous cette condition nous pouvons définir un paramètre réel γ par la relation

$$\cos \gamma = \frac{1}{2} \text{tr } \mathcal{P} \quad (4.86)$$

et dès lors

$$\lambda_+ = e^{i\gamma} \quad \lambda_- = e^{-i\gamma}.$$

Une valeur de l'énergie E sera permise si et seulement si l'équation (4.86) est satisfaite (\mathcal{P}_{11} et \mathcal{P}_{22} dépendent de E). Un calcul un peu long donne explicitement

$$\cos \gamma = ch2\kappa a \cos 2kb + \varepsilon / sh2\kappa a \sin 2kb \quad (4.87)$$

où $\varepsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}$.

Dans le cas $E > V_0$ le raisonnement est exactement le même et l'analogue de la condition (4.87) s'obtient sans difficulté (mais le calcul est assez long !!). Elle s'écrit

$$\cos \gamma = \cos 2k'a \cos 2kb - \frac{k'^2 + k^2}{2kk'} \sin 2k'a \sin 2kb \quad (4.88)$$

où $k'^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$.

Comme $\chi \geq 1$ il est évident à partir de l'équation (4.87) que les valeurs de E pour lesquelles

$$2kb = N\pi \quad (N \text{ entier})$$

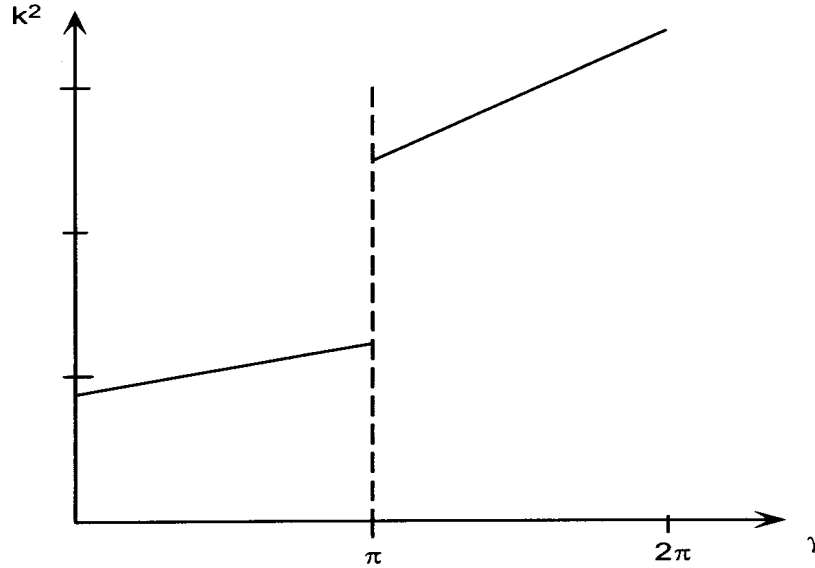
sont *interdites* (ou limites de régions permises).

Par continuité il en résulte qu'il y aura des domaines d'énergie où le problème admettra une solution séparés par des domaines d'énergie où il n'y a pas de solution.

Ce qui précède est une illustration simple d'un phénomène capital en physique de l'état solide : la structure en "bandes" des niveaux d'énergies d'un électron dans un réseau périodique !

Schématiquement la situation peut être représentée par le graphe suivant

$$(a = b = 1 \quad \frac{2mV_0}{\hbar^2} = \pi^2/4)$$



Nous avons donc ici un exemple où le spectre de $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$ est constitué de bandes (ou plages) continues séparées par des régions interdites.

VII L'oscillateur harmonique

Les oscillations harmoniques sont des phénomènes très importants aussi bien en physique classique qu'en physique quantique. Classiquement, pour un système en “équilibre stable”, de petits déplacements par rapport à cette position d'équilibre vont engendrer des “forces de rappel” qui tendent à rétablir l'équilibre. En première approximation ces forces peuvent être prises comme proportionnelles au déplacement et ceci caractérise un mouvement harmonique. Pour une particule de masse m soumise à une force de rappel $-kx$, l'équation de Newton

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$$

admet comme solution, $x = A \cos(\omega t + \phi)$, un mouvement de fréquence angulaire $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Pour des systèmes plus complexes, un déplacement par rapport à une position d'équilibre mène à des mouvements d'oscillations couplées assez compliqués. Mais en termes de coordonnées normales le problème se ramène à la superposition d'oscillations harmoniques simples de différentes fréquences angulaires. La physique moléculaire et en particulier la “spectroscopie moléculaire” est un exemple très concret de cette situation et c'est dans ce domaine de la physique que l'on trouve les applications et confirmations de la physique d'un oscillateur harmonique quantique. Il y a d'autres contextes où la notion de mode normal est importante comme par exemple la théorie des champs, mais nous n'en discuterons pas ici.

Par “oscillateur harmonique quantique” on entend un système dont l’amplitude de probabilité $\Psi(x, t)$ est solution de l’équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t)$$

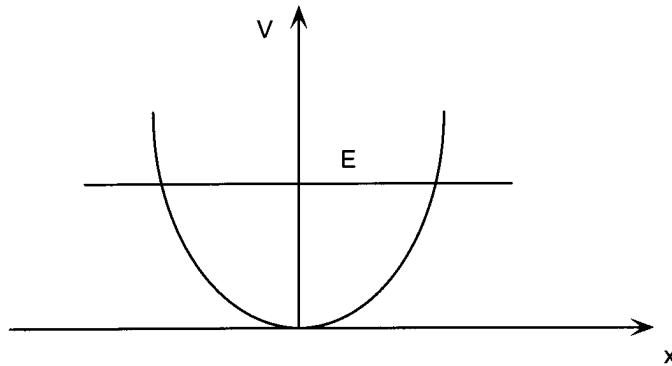
où

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2. \quad (4.89)$$

Par séparation des variables, nous sommes donc amenés à résoudre l’équation

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi(x) = E \phi(x). \quad (4.90)$$

Classiquement une particule dans un potentiel harmonique



est toujours liée i.e. confinée dans une région limitée de l’espace. Ainsi pour une énergie E (arbitraire mais fixée) la particule est confinée dans la région de l’espace où $V(x) \leq E$.

En mécanique quantique une particule dont l’amplitude de probabilité est solution de l’équation (4.90) sera également dans un état lié. A la lumière des exemples traités dans les paragraphes précédents, nous nous attendons à une amplitude de probabilité de carré sommable (i.e. normalisable) qui ne s’annule pas dans la région classiquement interdite mais y décroît suffisamment vite. Mais surtout nous nous attendons également à une quantification de l’énergie : l’équation (4.90) admet des solutions physiquement acceptables uniquement pour certaines valeurs discrètes de E . Effectivement c’est ce qui se passe. On trouve en effet que le spectre de l’hamiltonien (4.89) est donné par

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (4.91)$$

avec $n = 0, 1, 2, \dots$.

L’intervalle constant ($\hbar \omega$) entre deux “niveaux successifs” d’énergie est une des caractéristiques de l’oscillateur harmonique. Le terme $\frac{1}{2} \hbar \omega$ dans l’équation (4.91) est appelé “énergie au point zero”.

Classiquement la solution correspondant au minimum de l'énergie ($E_{\text{clas}} = 0$) est évidemment $x = 0$ et $p = 0$: la particule est au fond du “puits de potentiel” et ne bouge pas. Quantiquement une telle configuration est impossible en vertu des relations d'incertitude : $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$. L'énergie au point zero est donc un effet typiquement quantique. La confirmation expérimentale de cette énergie au point zero dans le contexte de la spectroscopie moléculaire sera discutée ailleurs.

Il est assez simple de vérifier que pour les E_n donnés par l'équation (4.91), l'équation de Schrödinger (4.90) admet effectivement des solutions normalisables. Nous esquissons la démarche.

Tout d'abord pour ne pas traîner de constantes superflues, on pose

$$\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \quad \xi = \alpha x \quad \text{et} \quad \lambda = \frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega}$$

dès lors l'équation (4.90) devient

$$(D^2 + \lambda - \xi^2)\phi(\xi) = 0 \quad (4.92)$$

où $D = \frac{d}{d\xi}$.

Il est aisé de vérifier par substitution dans (4.92) que $\phi_0(\xi) = e^{-\xi^2/2}$ est bien une solution de cette équation avec $\lambda_0 = 1$ i.e. $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$.

De même

$$(D - \xi)\phi_0(\xi) = \phi_1(\xi)$$

est également solution de (4.92) mais pour $\lambda_1 = 3$ i.e. $E_1 = 3/2\hbar\omega = \left(1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ et, plus généralement $(D - \xi)^n \phi_0(\xi) = \phi_n(x)$ est une solution de (4.92) pour $\lambda_n = 2n + 1$ i.e. $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$.

Pour vérifier ces assertions, le plus simple est de partir des “identités opératoriels”

$$(D - \xi)(D + \xi) = D^2 - [\xi, D] - \xi^2 = D^2 + 1 - \xi^2 \quad (4.93)$$

où $[\xi, D] = \xi \frac{d}{d\xi} - \frac{d}{d\xi} \xi = -1$.

Dès lors, la fonction $\phi_0(\xi)$ qui satisfait par $(D + \xi)\phi_0(\xi) = 0$, i.e. $\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\phi_0(\xi) = 0$, $\phi_0(\xi)$ soit encore $\phi_0(\xi) = e^{-\xi^2/2}$ est solution de $(D - \xi)(D + \xi)\phi_0(\xi) = 0$ qui est bien, en vertu de (4.93) l'équation (4.92) avec $\lambda = 1$; à partir de

$$(D + \xi)(D - \xi) = D^2 - \xi^2 - 1 \quad (4.94)$$

on a, immédiatement pour $\phi_1 = (D - \xi)\phi_0$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\phi_1 &= \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\left(\frac{d}{d\xi} + \xi\right)\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\phi_0 \\ &= \left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + 1\right)\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\phi_0 \end{aligned} \quad (4.94a)$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - 1\right)\phi_0 \\ &= \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)(-2)\phi_0 \end{aligned} \quad (4.94b)$$

soit encore, comparant (4.94a) et (4.94b),

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 + 3\right)\left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)\phi_0 = 0$$

ce qui est bien le résultat annoncé.

En résumé

$$\begin{aligned} \phi_0(\xi) &= e^{-\xi^2/2} & D\phi_0 &= -\xi e^{-\xi^2/2} \\ \phi_1(\xi) &= (D - \xi)e^{-\xi^2/2} = -2\xi e^{-\xi^2/2} \\ \phi_2(\xi) &= (D - \xi)\phi_1(\xi) = \{-2 + 4\xi^2\}e^{-\xi^2/2} \text{ etc } \dots \end{aligned}$$

En agissant avec l'opérateur $(\xi - D)^n$ sur $e^{-\xi^2/2}$ on obtient la même exponentielle $e^{-\xi^2/2}$ fois un polynôme de degré n en ξ . Mathématiquement on définit les polynômes d'Hermite $H_n(\xi)$ par l'expression

$$(\xi - D)^n e^{-\xi^2/2} = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi). \quad (4.95)$$

Nous pouvons donc écrire les solutions de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique sous la forme

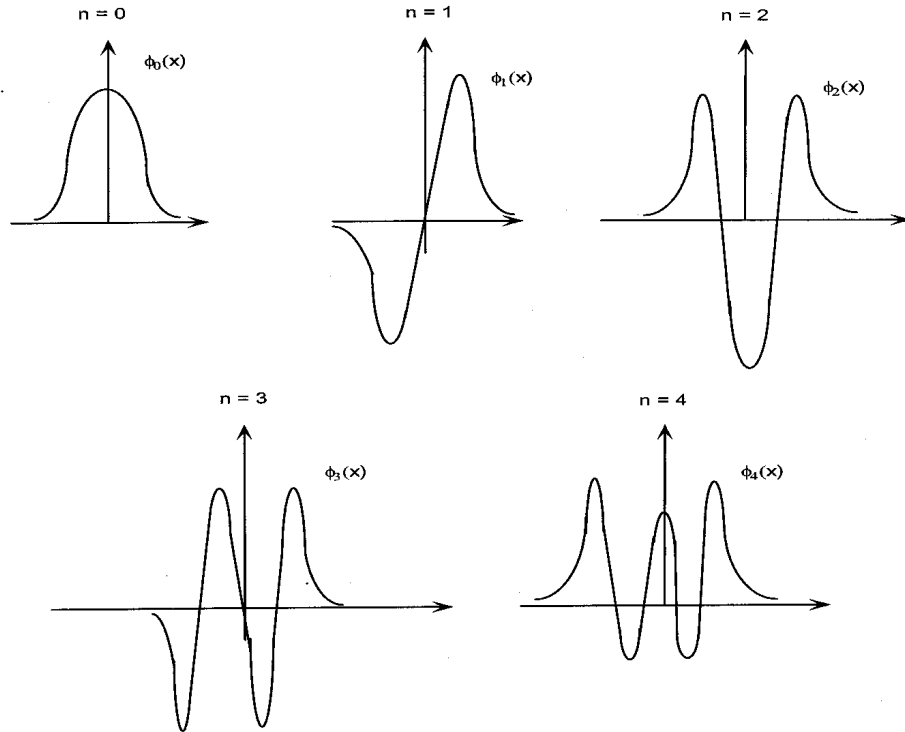
$$\phi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \quad (4.96)$$

avec C_n défini (à une phase près) par

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |C_n|^2 e^{-\xi^2} H_n^*(\xi) H_n(\xi) d\xi = 1. \quad (4.97)$$

Les manipulations qui précèdent montrent que pour les E_n définis par (4.91) il y a effectivement des solutions à l'équation de Schrödinger explicitement données par (4.96). Il reste à prouver que des solutions physiquement acceptables n'existent que pour ces valeurs de E et pour aucune autre. La démonstration n'a pas grand intérêt et nous l'omettons.

Dans la figure ci-dessous nous esquissons la forme des amplitudes de probabilité correspondant aux premiers niveaux de l'oscillateur harmonique



Il est utile de comparer ces figures à celles des amplitudes de probabilité pour le puits infini (chap III) : dans les deux cas, l'amplitude de probabilité du fondamental n'a pas de zéro (excepté aux extrémités), celle du premier état excité a un zéro supplémentaire, celle du deuxième état excité a deux zéros etc ... Cette propriété est tout à fait générale et porte le nom de “théorème des noeuds” : pour des états liés, le $n^{\text{ième}}$ état excité est décrit par une amplitude de probabilité qui a exactement n “noeuds” (i.e. zéros), extrémités exclues. Ce théorème est très utile pour se faire une idée qualitative de l'allure d'une amplitude de probabilité d'un état lié.

VIII L'opérateur “parité”

Le potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ est manifestement symétrique sous la transformation $x \rightarrow -x$ (parité)

$$V(x) = V(-x). \quad (4.98)$$

Pour un potentiel symétrique, si $\phi(x)$ est solution de l'équation de Schrödinger alors $\phi(-x)$ l'est également et par conséquent toute solution de l'équation de Schrödinger peut être prise comme une fonction paire

$$\phi_{\text{paire}}(x) \propto \phi(x) + \phi(-x) \quad (4.99)$$

ou impaire

$$\phi_{\text{imp}}(x) \propto \phi(x) - \phi(-x). \quad (4.100)$$

Par construction même

$$\begin{aligned} \phi_{\text{paire}}(x) &= +\phi_{\text{paire}}(-x) \\ \phi_{\text{impaire}}(x) &= -\phi_{\text{impaire}}(-x). \end{aligned}$$

Formellement, les considérations qui précèdent reviennent à définir un *opérateur parité*, \hat{P} :

$$\hat{P}\phi(x) = \phi(-x). \quad (4.101)$$

Par définition $\hat{P}^2\phi(x) = \hat{P}(\hat{P}\phi(x)) = \hat{P}\phi(-x) = \phi(x)$ et comme cette identité est valable pour toute fonction de carré sommable, nous écrivons

$$(\hat{P})^2 = 1. \quad (4.102)$$

Pour un potentiel symétrique (4.98), on vérifie que l'opérateur \hat{P} commute avec l'opérateur \hat{H} à savoir

$$\hat{P}\hat{H} = \hat{H}\hat{P} \quad \text{ou encore} \quad [\hat{P}, \hat{H}] = 0. \quad (4.103)$$

En effet pour toute fonction de carré sommable nous avons

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{H}\phi(x) &= \hat{P}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x) + V(x)\phi(x)\right\} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial(-x)^2}\phi(-x) + V(-x)\phi(-x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(-x) + V(-x)\phi(-x) \\ &= \hat{H}\phi(-x) = \hat{H}\hat{P}\phi(x) \end{aligned}$$

Puisque $(\hat{P})^2 = 1$, les valeurs propres de l'opérateur \hat{P} sont ± 1 . Dans le cas de l'oscillateur harmonique, les amplitudes de probabilité correspondant aux divers niveaux d'énergie sont des *fonctions propres* (ou états propres) simultanées des opérateurs \hat{H} et \hat{P} . Pour les ϕ_n donnés par l'équation (4.96), nous avons, en effet :

$$\hat{H}\phi_n = E_n\phi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\phi_n \quad (4.104)$$

et

$$\hat{P}\phi_n = (-1)^n\phi_n. \quad (4.105)$$

IX L'oscillateur harmonique à 2 dimensions

Il est très instructif à ce stade de résoudre le problème de l'oscillateur harmonique à 2 dimensions. L'équation de Schrödinger s'écrit dans ce cas sous la forme :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, y, t) = \hat{H} \Psi(x, y, t) \quad (4.106)$$

où

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{y}^2 \quad (4.107)$$

et

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{et} \quad \hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}. \quad (4.108)$$

La probabilité de trouver la particule dans une surface $dxdy$ centrée au point (x, y) est donnée par

$$P(x, y, t)dxdy = |\Psi(x, y, t)|^2 dxdy. \quad (4.109)$$

Bien entendu, dans le cas qui nous occupe,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy |\Psi(x, y, t)|^2 = 1. \quad (4.110)$$

On dira encore que $\Psi(x, y, t)$ est une fonction de 2 variables spatiales (x, y) et du temps qui est de “carré sommable”. Bien entendu, il y a maintenant deux opérateurs “position”, \hat{x} et \hat{y} définis par

$$\hat{x}\Psi(x, y, t) \stackrel{\text{def}}{=} x\Psi(x, y, t) \quad (4.111)$$

$$\hat{y}\Psi(x, y, t) \stackrel{\text{def}}{=} y\Psi(x, y, t) \quad (4.112)$$

Les opérateurs impulsions \hat{p}_x et \hat{p}_y sont définis par (4.108). Un calcul élémentaire donne à présent

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar 1 \quad (4.113)$$

$$[\hat{p}_y, \hat{y}] = -i\hbar 1 \quad (4.114)$$

tandis que

$$[\hat{p}_x, \hat{y}] = [\hat{p}_y, \hat{x}] = [\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \quad (4.115)$$

La signification physique de ces relations sera discutée ultérieurement. Pour l'instant nous nous contentons de résoudre l'équation (4.106). Par séparation des variables

$$\Psi(x, y, t) = f(t)\phi(x, y) \quad (4.116)$$

nous avons l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}\phi(x, y) = E\phi(x, y) \quad (4.117)$$

soit, explicitement,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \phi(x, y) + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \phi(x, y) = E \phi(x, y). \quad (4.118)$$

Cette dernière équation est elle-même séparable en x et y , c'est-à-dire que nous pouvons la résoudre en posant

$$\phi(x, y) = X(x)\Psi(y). \quad (4.119)$$

En substituant l'équation (4.119) dans (4.118), nous obtenons

$$\frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 X(x)}{X(x)} + \frac{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 Y(y)}{Y(y)} = E \quad (4.120)$$

soit encore

$$E = E^{(1)} + E^{(2)} \quad (4.121)$$

et

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 X(x) = E^{(1)} X(x) \quad (4.122)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y(y)}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 Y(y) = E^{(2)} Y(y) \quad (4.123)$$

Ces dernières équations sont celles d'un oscillateur harmonique à une dimension et nous avons complètement résolu ce problème dans le § 7. Dès lors, le spectre de l'oscillateur harmonique à 2 dimensions est donné par

$$E_{n,m} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \left(m + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = (n + m + 1) \hbar \omega \quad (4.124)$$

Le niveau fondamental a donc une énergie $E_{00} = \hbar \omega$. Les premiers niveaux excités ont une énergie $E_{10} = E_{01} = 2\hbar \omega$ et on dira que la valeur propre $2\hbar \omega$ de l'hamiltonien \hat{H} est *doublement* dégénérée. De même $3\hbar \omega$ est une valeur propre de \hat{H} qui est *triplement* dégénérée et ainsi de suite. Les amplitudes de probabilité correspondantes sont explicitement données

ci-dessous

$$E = \hbar\omega \quad \phi(x, y) = e^{-\xi^2/2} e^{-\eta^2/2} \left(\xi = \alpha x, \eta = \alpha y \quad \alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{1/2} \right)$$

$$E = 2\hbar\omega \quad \begin{cases} \text{soit } H_1(\xi) e^{-(\frac{\xi^2+\eta^2}{2})} \\ \text{soit } H_1(\eta) e^{-(\frac{\xi^2+\eta^2}{2})} \end{cases}$$

soit encore une combinaison linéaire

$$E = 3\hbar\omega \quad \text{soit} \quad H_1(\xi) H_1(\eta) e^{-(\frac{\xi^2+\eta^2}{2})}$$

$$\text{soit} \quad H_2(\xi) e^{-(\frac{\xi^2+\eta^2}{2})} \quad \text{soit une combinaison}$$

$$\text{soit } H_2(\eta) e^{-(\frac{\xi^2+\eta^2}{2})}$$

linéaire de ces solutions

et ainsi de suite. En posant $N = n + m$, le $N^{\text{ième}}$ niveau d'énergie sera $(N + 1)$ fois dégénéré. Cette notion de “dégénérescence d'un niveau d'énergie” donnée sera importante dans le développement du formalisme de la mécanique quantique et nous y reviendrons. L'oscillateur harmonique à 2 dimensions est un exemple simple d'une telle situation.

Nous pouvons également définir l'opérateur parité, \hat{P} , par

$$\hat{P}\phi(x, y) = \phi(-x, -y)$$

et, à nouveau $(\hat{P})^2 = 1$ et $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$. Le fondamental ($N = 0$) a une parité positive, tandis que les états du $N^{\text{ième}}$ niveau ont une parité $(-1)^N$.

Chapitre V

Le principe de superposition linéaire

Dans le chapitre précédent nous avons explicité des exemples de solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger à une dimension dans un certain nombre de cas simples. Par solution stationnaire, on entend une solution du type

$$\Psi(x, t) = \phi(x)e^{-iEt/\hbar}. \quad (5.1)$$

Pour une telle solution, $P(x, t) = |\Psi|^2 = |\phi|^2$ est indépendante du temps (d'où le nom "stationnaire"). Plus particulièrement nous avons trouvé les valeurs de E pour lesquelles une solution de la forme (5.1) existait. Ces valeurs de E définissent le "spectre de l'hamiltonien" à savoir les valeurs propres

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x) \quad (5.2)$$

de l'opérateur \hat{H} ainsi que les fonctions propres correspondantes. Nous avons vu (puits de potentiel infini ou oscillateur harmonique à une dimension) que pour des "états liés" ce spectre était discret (quantification de l'énergie) tandis que pour une particule libre (ou pour des "états de diffusion") le spectre de \hat{H} est continu. L'amplitude de probabilité correspondant à une valeur donnée de E dans le spectre continu n'est pas "normalisable" et dans ces conditions on ne peut plus parler que de probabilités relatives.

Pour développer davantage notre intuition de la physique quantique nous commençons par nous restreindre à des états liés et nous cherchons à caractériser la "solution générale" de l'équation de Schrödinger dans le cas d'un hamiltonien dont le spectre est discret.

I Superposition d'états

Pour fixer les idées nous allons considérer le cas du puits infini (voir Chapitre III). Il est fortement recommandé de répéter les raisonnements et calculs qui vont suivre dans le cas de l'oscillateur harmonique à 1 dimension.

Les solutions stationnaires de notre problème ont été déterminées dans le chapitre III :

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

$$\Psi_n(x, t) = \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = e^{i\alpha_n} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5.3)$$

et

$$\hat{H}\phi_n(x) = E_n \phi_n(x) \quad n = 1, 2, \dots$$

Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, toute superposition (linéaire) de solutions est également une solution. Considérons, à titre d'exemple, la superposition suivante :

$$\Psi(x, t) = c_1 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (5.4)$$

nous avons absorbé les phases α_1 et α_2 dans les paramètres complexes c_1 et c_2 .

Suivant les principes généraux de la mécanique quantique, $\Psi(x, t)$ donné par l'équation (5.4) est une solution de l'équation de Schrödinger et comme telle doit donc être considérée comme l'*amplitude de probabilité d'un "état quantique"*. Qu'est-ce que cela veut dire ?

Tout d'abord, l'amplitude $\Psi(x, t)$ est-elle de "carré sommable" ?

$$\begin{aligned} P(x, t) = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) &= |c_1|^2 \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} + |c_2|^2 \frac{2}{L} \sin^2 \frac{2\pi x}{L} \\ &+ c_1^* c_2 \frac{2}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-i(E_2 - E_1)t/\hbar} \\ &+ c_2^* c_1 \frac{2}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} \end{aligned} \quad (5.5)$$

et

$$\int_0^L P(x, t) dx = |c_1|^2 + |c_2|^2 \quad (5.6)$$

puisque

$$\frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} dx = 0! \quad (5.7)$$

L'équation (5.7) est d'une importance capitale et nous y reviendrons. Pour l'instant considérons l'éq. (5.6) : pour toutes les valeurs des nombres complexes c_1 et c_2 telles que $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, l'amplitude (5.4) est bien sûr de carré sommable et nous interprétons, comme précédemment $P(x, t)$ comme la "densité de probabilité" de trouver la particule quantique au point x , à l'instant t .

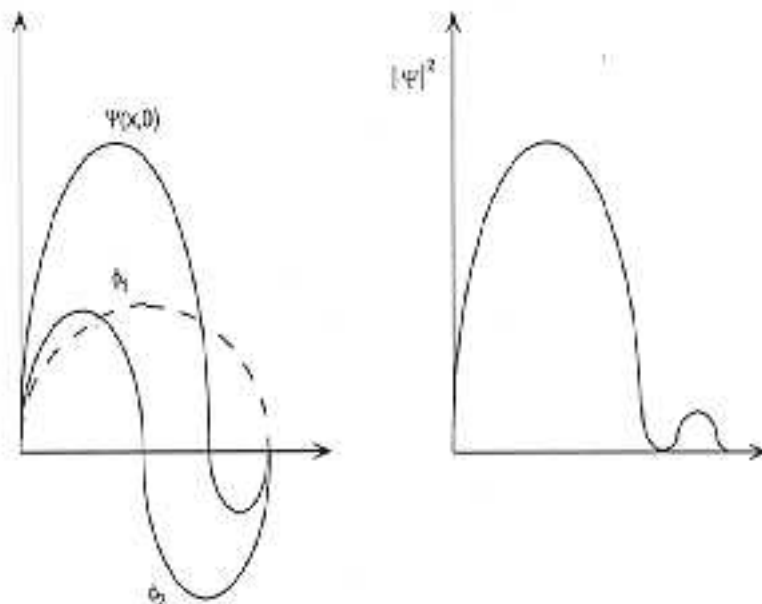
Il est instructif d'illustrer graphiquement le cas particulier où $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Dans ce cas

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin \frac{\pi x}{L} e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{L}} \sin \frac{2\pi x}{L} e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (5.8)$$

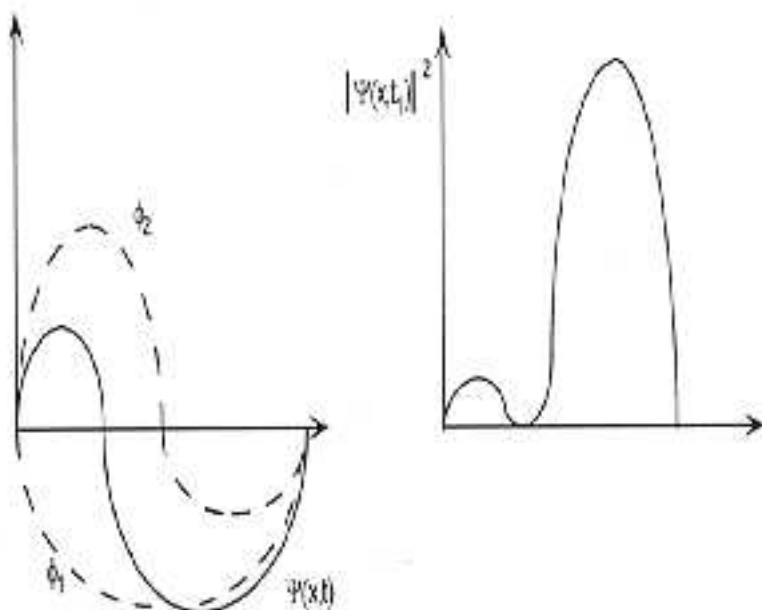
et

$$P(x,t) = \frac{1}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} + \frac{1}{L} \sin^2 \frac{2\pi x}{L} + \frac{2}{L} \sin \frac{\pi x}{L} \sin \frac{2\pi x}{L} \cos \frac{E_2 - E_1}{\hbar} t. \quad (5.9)$$

Comme $E_2 = 4E_1$, nous avons au temps $t = 0$



tandis qu'au temps $t_1 = \frac{h}{2E_1}$



La variation au cours du temps de la distribution de probabilité est celle d'un “paquet de probabilité” qui fait un mouvement de va et vient entre les murs du puits de potentiel. Ce

mouvement résulte de la superposition de “deux états propres de l’énergie” et la dépendance temporelle est déterminée par la différence des deux énergies $E_2 - E_1$.

Mais que signifie “superposer deux états propres de l’énergie” ou plus précisément quelle est l’énergie d’une particule quantique décrite par (5.4) ?

Pour répondre à la question, calculons la valeur moyenne de “l’opérateur énergie” c’est-à-dire de l’hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$. Avec les résultats du chapitre III et l’éq. (5.7), on obtient

$$\langle \hat{H} \rangle = |c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2. \quad (5.10)$$

Cette relation signifie qu’une mesure de l’énergie d’une particule quantique dont l’amplitude de probabilité est donnée par (5.4) donnera toujours comme résultat soit E_1 , soit E_2 et jamais une autre valeur. En répétant la mesure de l’énergie sur un grand nombre de particules toutes préparées dans l’état $\Psi(x, t)$ de l’éq. (5.4), on obtient la valeur E_1 une fraction $|c_1|^2$ de fois et la valeur E_2 une fraction $|c_2|^2$ de fois. Dans le cas où $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, l’éq. (5.10) donne

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{E_1 + E_2}{2}$$

qu’on peut bien appeler “l’énergie moyenne” de la particule quantique mais une “mesure” de l’énergie ne donnera jamais cette valeur : elle donnera toujours comme valeur soit E_1 , soit E_2 .

Pour bien comprendre ce qui précède, il est utile de faire l’analogie entre l’observable “énergie” que nous discutons ici et l’observable “position” dans l’expérience à 2 trous (écran B) (Chap. II).

Expérience à 2 trous

- $A = A_1 + A_2$
où A_i est l'amplitude de probabilité de passer par le trou i , c'est-à-dire d'avoir la position x_i à un instant donné ($i = 1, 2$).
- La "position" n'est pas un attribut intrinsèque d'une particule quantique.
- "Mesurer" la position donne toujours soit la valeur x_1 , soit la valeur x_2 .
- La valeur moyenne de l'observable position (à l'écran B) est donnée par $x_1 p_1 + x_2 p_2$
où p_1 ne dépend que de A_1
et p_2 ne dépend que de A_2 .

Observable "énergie"

- $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$
où Ψ_i est l'amplitude de probabilité d'avoir une énergie E_i .
- L'énergie n'est pas un attribut intrinsèque d'une particule quantique.
- Mesurer l'énergie donne toujours soit la valeur E_1 , soit la valeur E_2 .
- La valeur moyenne de l'énergie est donnée par $E_1 p_1 + E_2 p_2$
où $p_1 = |c_1|^2$ ne dépend que de Ψ_1
 $p_2 = |c_2|^2$ ne dépend que de Ψ_2 .

Percer l'écran B est une manière "expérimentale" de discrétiser l'observable position, tandis que dans le puits infini le spectre de \hat{H} est automatiquement *discret*.

Il est intéressant de poursuivre l'analyse de la situation pour répondre à la question : quel est le résultat de la mesure d'une "observable" en mécanique quantique.

- si la position n'est pas mesurée l'amplitude est donnée par $A = A_1 + A_2$ et ceci mène bien entendu à des “interférences” caractéristiques de la mécanique quantique.
- Si la position est mesurée et que le résultat est x_1 (resp. x_2) alors l'amplitude de probabilité après mesure est A_1 (resp. A_2).
- si l'énergie n'est pas mesurée l'amplitude $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ et ici aussi il y aura des interférences (voir p.ex. Eq. (5.5)) (notre monde “unidimensionnel” est un peu trop académique pour des confirmations expérimentales, mais à 3 dimensions ces phénomènes d'interférence sont observés).
- Si l'énergie est mesurée et que le résultat est E_1 (resp. E_2) l'amplitude de probabilité après mesure est Ψ_1 (resp. Ψ_2).

Il est important de bien comprendre ces assertions. Dans le contexte de l'expérience à 2 trous nous avons déjà insisté sur le fait que si la position n'est pas mesurée, l'amplitude de probabilité est donnée par $A = A_1 + A_2$ et dès lors la probabilité de détecter la particule en un point de l'écran C est $|A_1 + A_2|^2$. Si la position *est mesurée*, cette probabilité est donnée par $|A_1|^2 + |A_2|^2$ ce qui est une autre manière de dire que le résultat d'une mesure de la position à l'écran B (x_1 ou (exclusif) x_2) modifie l'amplitude (A_1 ou (exclusif) A_2 au lieu de $A_1 + A_2$). Une mesure “perturbe” le système : passer de $A_1 + A_2$ à l'amplitude A_1 ou à l'amplitude de A_2 n'est pas un effet négligeable. Dans le contexte de l'équation de Schrödinger, l'effet de l'opération “mesurer l'énergie” pour le système $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2$ est de “réduire” l'amplitude $\Psi_1 + \Psi_2$ à une amplitude (Ψ_1 ou Ψ_2) correspondant à l'état du système quantique dont l'énergie est celle qui a été mesurée. Cette réduction de l'amplitude de probabilité (encore appelée “effondrement de la fonction d'ondes”) est une opération mathématique qui encode le résultat d'une mesure. Il en va ici de l'énergie comme de la position dans le cas de l'expérience à 2 trous et comme de toute “observable” en mécanique quantique ! Intuitivement l'amplitude de probabilité se construit par superposition (linéaire) des amplitudes correspondant à chacune des possibilités définies par la situation physique envisagée. Le résultat d'une mesure est d'*exclure* une (ou plusieurs) de ces possibilités qui dès lors ne peuvent plus contribuer à la construction de l'amplitude. L'effet d'une mesure est donc d'*ajuster* l'amplitude de probabilité

à celle qui correspond au résultat obtenu.

Les Eqs. (5.6) et (5.10) sont des exemples de propriétés universelles des “observables” en mécanique quantique. Pour le montrer nous devons préciser un peu la structure mathématique de “l'espace des fonctions de carré sommable”. C'est l'objet du paragraphe suivant.

II L'espace de Hilbert

Pour bien préciser les concepts mathématiques qui vont suivre, nous considérons le cas où le domaine accessible au système quantique est la droite réelle tout entière. Les fonctions complexes $\phi(x)$ définies sur la droite réelle peuvent être vues comme des éléments d'un espace vectoriel (de dimension infinie) c'est-à-dire comme des “vecteurs”. Nous définissons le produit scalaire de deux fonctions $\phi_1(x)$ et $\phi_2(x)$ par

$$\langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_2^*(x) \phi_1(x) dx. \quad (5.11)$$

La norme d'une fonction (ou longueur du vecteur) est alors donnée à partir de

$$\|\phi\|^2 = \langle \phi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \phi(x) dx \quad (5.12)$$

et deux fonctions dont le produit scalaire est nul seront dites orthogonales. Bien entendu il y a des conditions à imposer à une fonction pour que ces expressions aient du sens. Nous supposons toujours que ces conditions sont satisfaites.

Parmi les opérateurs pouvant agir sur cet espace de fonctions, nous nous intéressons plus particulièrement aux opérateurs *linéaires* et parmi ceux-ci aux opérateurs *hermitiens*. Un opérateur \hat{A} est linéaire si

$$\hat{A}\{\alpha\phi_1(x) + \beta\phi_2(x)\} = \alpha\hat{A}\phi_1(x) + \beta\hat{A}\phi_2(x). \quad (5.13)$$

L'hermitien conjugué, \hat{A}^+ , d'un opérateur \hat{A} est défini par

$$\langle \phi_2 | \hat{A}\phi_1 \rangle = \langle \hat{A}^+\phi_2 | \phi_1 \rangle \quad (5.14)$$

et un opérateur A est hermitien si $\hat{A} = \hat{A}^+$.

Les opérateurs $\hat{x}, \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ et $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$ que nous avons “associés” aux observables physiques appelées position, impulsion et énergie sont des opérateurs linéaires et sont également des opérateurs hermitiens. En particulier

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{x} \chi \rangle &= \int \phi^*(x) (\hat{x} \chi(x)) dx = \int \phi^*(x) x \chi(x) dx = \int x \phi^* \chi dx \\ &= \int (\hat{x} \phi)^* \chi dx = \langle \hat{x} \phi | \chi \rangle \end{aligned}$$

et de même

$$\begin{aligned}\langle \phi | \hat{p} \chi \rangle &= \int \phi^*(x) (-i\hbar) \frac{\partial \chi}{\partial x} dx = i\hbar \int \frac{\partial \phi^*}{\partial x} \chi(x) dx \\ &= \int \left(-i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^* \chi(x) dx = \langle \hat{p} \phi | \chi \rangle\end{aligned}$$

La démonstration est la même pour \hat{H} .

Notez bien que si F et G sont deux opérateurs quelconques

$$(FG)^+ = G^+ F^+ \quad (5.15)$$

et par conséquent le produit de deux opérateurs hermitiens n'est hermitien que si les opérateurs commutent !

Une fonction $\phi(x)$ est appelée fonction propre (ou vecteur propre ou encore état propre) d'un opérateur A si

$$A\phi(x) = \lambda\phi(x) \quad \lambda \in \mathbb{C}. \quad (5.16)$$

λ est alors appelé une valeur propre de l'opérateur A et l'ensemble des valeurs propres constitue le *spectre* de l'opérateur.

Dans le chapitre IV nous avons en fait déterminé le spectre de l'hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$ pour quelques potentiels simples. En particulier, pour l'oscillateur harmonique à une dimension, nous avons vu que le spectre de \hat{H} était *discret* et donné par $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, tandis que pour l'effet tunnel le spectre de \hat{H} était *continu* ($E > 0$). Pour le puits de potentiel fini nous avons un spectre de \hat{H} dont une partie est *discrète* et une partie est *continue*. Il est clair, sur ces exemples que l'analyse spectrale d'un opérateur est un ingrédient important de la mécanique quantique !

Notons encore qu'une valeur propre peut aussi être *dégénérée* c'est-à-dire que l'éq. (5.16) peut admettre comme solutions, pour une même valeur de λ , plusieurs fonctions linéairement indépendantes. Un exemple a été donné pour un spectre discret (oscillateur harmonique à 2 dimensions) ainsi que pour un spectre continu (faisceau de particules venant de la gauche, ou venant de la droite).

Le "spectre continu" d'une observable physique, c'est-à-dire d'un opérateur hermitien, pose quelques difficultés dans le contexte mathématique esquissé ci-dessus. Ainsi, pour l'équation de Schrödinger d'une particule libre, nous avons vu que les solutions de

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x)$$

ou

$$\frac{\hat{p}^2}{2m}\phi(x) = E\phi(x)$$

étaient données par $\phi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$ où $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ et quelles que soient les valeurs de c_1 et $c_2 (\neq (0,0))$, une telle fonction n'est pas de carré sommable i.e.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x)\phi(x)dx \quad \text{diverge.}$$

Cette “difficulté” est d'ordre mathématique et non pas physique et nous reviendrons en détail sur cette question dans le paragraphe 4. Pour l'instant nous nous restreignons à des opérateurs hermitiens dont le spectre est purement discret. Le prototype de cette situation est l'oscillateur harmonique à 1 dimension.

Les propriétés suivantes des opérateurs hermitiens sont fondamentales :

Théorème II.1 *Les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles.*

En effet, soit λ une valeur propre et $\phi(x)$, la fonction propre correspondante $\hat{A}\phi(x) = \lambda\phi(x)$.

Dès lors

$$\int \phi^*(x)\hat{A}\phi(x)dx = \int (\hat{A}\phi)^*\phi(x)dx = \lambda \int \phi^*(x)\phi(x)dx = \lambda^* \int \phi^*(x)\phi(x)dx$$

et par conséquent $\lambda = \lambda^*$.

Théorème II.2 *Les fonctions propres correspondant à des valeurs propres différentes sont orthogonales.*

Si $\hat{A}\phi(x) = \lambda\phi(x)$ et $\hat{A}\chi(x) = \mu\chi(x)$, $\mu \neq \lambda$
alors

$$\int \phi^*(x)\chi(x)dx = 0.$$

En effet

$$\begin{aligned} \int \phi^*(x)\hat{A}\chi(x)dx &= \mu \int \phi^*(x)\chi(x)dx \\ &= \int (\hat{A}\phi)^*\chi(x)dx = \lambda \int \phi^*(x)\chi(x)dx \end{aligned}$$

et comme $\mu \neq \lambda$ la proposition est démontrée.

Théorème II.3 *L'ensemble des fonctions propres d'un opérateur hermitien forme une base orthogonale de l'espace de Hilbert.*

La démonstration de ce théorème n'est pas élémentaire et nous ne la donnerons pas ici. Une petite précision : lorsqu'une valeur propre est dégénérée (disons p fois), les vecteurs

propres engendrent un espace vectoriel de dimension p et par le procédé d'orthogonalisation de Gram-Schmidt on peut toujours construire une base orthogonale de cet espace vectoriel.

L'importance du théorème 3 est qu'il garantit pour toute fonction de carré sommable $\phi(x)$ l'existence et la convergence en moyenne quadratique de la série infinie

$$\phi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x) \quad (5.17)$$

où les $\phi_n(x)$ sont toutes les fonctions propres d'un opérateur hermitien. Qui plus est les coefficients c_n sont déterminés

$$c_n = \int \phi_n^*(x) \phi(x) dx. \quad (5.18)$$

Nous avons maintenant tous les outils nécessaires pour construire et décrire la solution générale de l'équation de Schrödinger dans le cas où l'hamiltonien \hat{H} a un spectre discret.

III Solution générale de l'équation de Schrödinger (spectre discret)

On a, par hypothèse

$$\hat{H} \phi_n(x) = E_n \phi_n(x) \quad (5.19)$$

avec les propriétés

$$\int \phi_m^*(x) \phi_n(x) dx = \delta_{mn}. \quad (5.20)$$

On se donne une amplitude de probabilité disons au temps $t = 0$ (on "prépare" le système).

Soit $\Psi(x, 0)$, cette amplitude. On écrit

$$\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \phi_n(x)$$

avec $c_n = \int \phi_n^* \Psi(x, 0) dx$ et la solution générale de l'équation de Schrödinger est alors

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (5.21)$$

Si on mesure l'énergie du système dont l'amplitude de probabilité est donnée par (5.21), la valeur moyenne de \hat{H}

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \int \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) dx = \sum_{n,m} c_n^* c_m e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} E_m \int \phi_n^*(x) \phi_m(x) dx \\ &= \sum_n |c_n|^2 E_n \end{aligned} \quad (5.22)$$

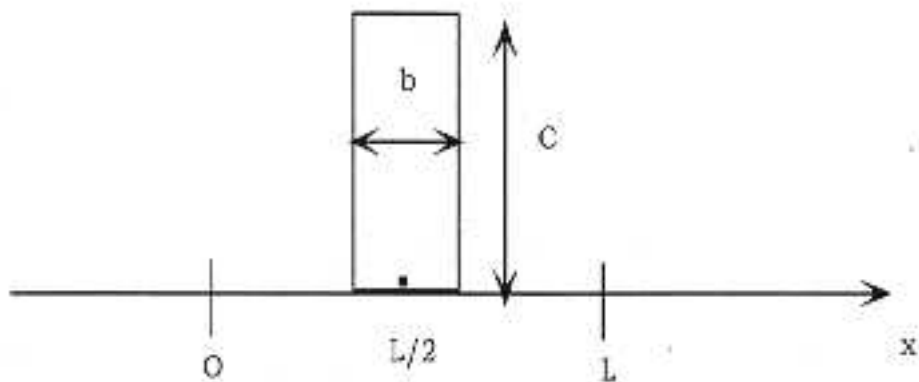
dont l'interprétation est la même que celle de l'éq. (5.10) : une mesure de l'énergie donne toujours comme résultat une *valeur propre* de \hat{H} , E_1, E_2, \dots et en répétant la mesure un grand nombre de fois sur des particules qui sont toutes préparées dans le même état $\Psi(x, 0)$ à l'instant $t = 0$ (cette expression a maintenant un sens mathématique précis), la probabilité d'obtenir E_1 est donnée par $|c_1|^2$, la probabilité d'obtenir E_n est donnée par $|c_n|^2$ etc ...

Remarquons également que si le système est préparé dans un état propre de \hat{H} , par exemple

$$\Psi(x, 0) = \phi_n(x) \quad (5.23)$$

une mesure de l'énergie donnera toujours E_n . Mais comme nous l'avons déjà vu, dans l'état stationnaire (5.23) nous n'aurons plus de valeur précise ni pour la position ni pour l'impulsion mais des distributions de probabilité : une particule quantique peut très bien avoir une énergie précise, mais alors sa position et son impulsion ne sont plus données que par des distributions de probabilité !

Considérons à présent un exemple explicite de la solution générale dans le cas du puits infini. Supposons qu'à l'instant $t = 0$ nous ayons une amplitude de probabilité de la forme



c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0) &= 0 & \text{pour} & & x \leq \frac{L}{2} - \frac{b}{2} \\ \Psi(x, 0) &= 0 & \text{pour} & & x \geq \frac{L}{2} + \frac{b}{2} \\ \Psi(x, 0) &= C & \text{pour} & & \frac{L}{2} - \frac{b}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} + \frac{b}{2} \end{aligned} \quad (5.24)$$

Intuitivement, il s'agit d'une situation où initialement la particule quantique est *localisée* dans une région $\left[-\frac{b}{2}, \frac{b}{2}\right]$ autour du point $\frac{L}{2}$.

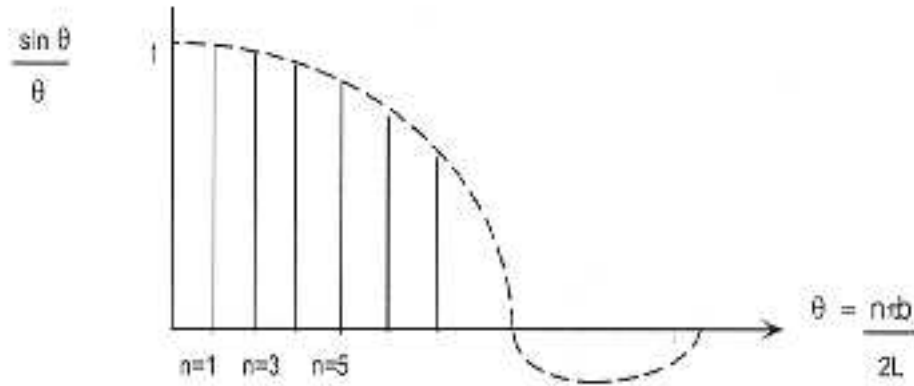
Nous avons $\Psi(x, 0) = \sum_n c_n \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}$ et les c_n sont donnés par

$$\begin{aligned} c_n &= \sqrt{\frac{2}{L}} \int \sin \frac{n\pi x}{L} \Psi(x, 0) dx = \sqrt{\frac{2}{L}} C \int_{\frac{L-b}{2}}^{\frac{L+b}{2}} \sin \frac{n\pi x}{L} dx \\ &= \sqrt{2L} \frac{C}{n\pi} \left(\cos \frac{n\pi}{2L} (L-b) - \cos \frac{n\pi}{2L} (L+b) \right) = \frac{2C\sqrt{2L}}{n\pi} \sin \frac{n\pi}{2} \sin \frac{n\pi b}{2L} \end{aligned} \quad (5.25)$$

À cause du facteur $\sin \frac{n\pi}{2}$, les c_n pour n pair sont nuls et les c_n impairs ont des signes alternés

$$n \text{ impair} , \quad c_n = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{\sqrt{2L}}{L} C b \frac{\sin n\pi b/2L}{n\pi b/2L} \quad (5.26)$$

La fonction $\frac{\sin \theta}{\theta}$, pour $\theta = \frac{n\pi b}{2L}$, est esquissée ci-dessous $\left(\frac{b}{L} \sim \frac{1}{5}\right)$.



Les coefficients c_n sont obtenus en multipliant les ordonnées des points $n = 1 \left(\theta = \frac{\pi b}{2L}\right)$, $n = 3 \left(\theta = \frac{3\pi b}{2L}\right)$ etc ... par le facteur $\pm \frac{\sqrt{2L}bC}{L}$.

La solution de l'équation de Schrödinger pour la condition initiale précisée par les Eqs. (5.24) est donc

$$\Psi(x, t) = \sum_{n \text{ impair}} (-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{\sqrt{2L}}{L} C b \frac{\sin n\pi b/2L}{n\pi b/2L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5.27)$$

où bien entendu E_n est donné par l'éq. (3.32).

L'aspect le plus intéressant de ce petit exercice est qu'il est parfaitement possible de construire des amplitudes de probabilité correspondant à une particule plus ou moins bien localisée dans le puits de potentiel : le prix à payer pour cette "localisation" est qu'il faut superposer un grand nombre d'états propres de \hat{H} . Inversement une amplitude de probabilité correspondant à une particule quantique d'énergie bien déterminée dans le puits ne "localise" pas du tout cette particule. Nous reviendrons sur la signification physique de cet état de choses dans le contexte des relations d'incertitude.

IV Le spectre continu

1. Normalisation dans une “boîte”

Nous avons déjà mentionné à plusieurs reprises que les solutions de l'équation aux valeurs propres

$$\hat{p}\phi(x) = -i\hbar \frac{d\phi(x)}{dx} = p\phi(x) \quad (5.28)$$

étaient données par $\phi(x) \sim e^{ipx/\hbar}$ pour tout p réel. Le spectre de l'opérateur impulsion est donc *continu*. Les fonctions propres de \hat{p} ne sont pas normalisables i.e. l'intégrale $\int \phi^*(x)\phi(x)dx \sim \int dx$ diverge. Cette difficulté est typique du spectre continu de n'importe quel opérateur.

Un état propre de l'impulsion correspond à une situation où le système quantique n'est pas du tout “localisé” : la probabilité de trouver la particule en un point donné est la même pour tout point de la droite réelle.

Une manière quelquefois commode de résoudre ce problème du spectre continu de \hat{p} ou de la “non-localisation” de la particule quantique est d'enfermer le système dans une boîte (unidimensionnelle) de longueur L et d'imposer des conditions au bord appropriées. De cette manière on force évidemment le système à être un peu “localisé” (il est dans la boîte !) et, comme nous le verrons, cela résout le problème pour l'opérateur impulsion. La même démarche vaut pour l'opérateur $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ correspondant à l'énergie d'une particule libre. Physiquement il est clair qu'enfermer le système quantique dans une boîte suffisamment grande ne devrait pas avoir d'effet significatif sur le comportement du système (après tout, nous sommes tous enfermés dans une boîte probablement finie, à savoir l'univers !).

Explicitons la démarche : on enferme le système dans une boîte définie par la région $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ (pour des raisons de symétrie, le choix de l'origine comme centre de la boîte est un peu plus commode que la paramétrisation que nous avons adoptée dans le cas du puits infini). Aux extrémités de la boîte nous imposons à présent une *condition au bord périodique* à savoir

$$\phi\left(-\frac{L}{2}\right) = \phi\left(\frac{L}{2}\right) \quad (5.29)$$

Les états propres de l'impulsion sont maintenant définis comme des solutions de l'éq. (5.28) qui satisfont la condition de périodicité

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ipx/\hbar} \quad \text{avec} \quad e^{ipL/\hbar} = 1 \quad \text{c-à-d} \quad p = \frac{2\pi\hbar}{L} n \quad (5.30)$$

($n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$).

Nous avons bien entendu les relations d'orthogonalité

$$\int_{-L/2}^{L/2} \phi_p^*(x) \phi_{p'}(x) dx = \delta_{p'p} \quad (5.31)$$

et toute amplitude de probabilité pourra se développer en termes des fonctions propres (5.30).

La solution de la boîte est parfaitement acceptable pour l'opérateur impulsion \hat{p} ou pour l'hamiltonien d'une particule libre \hat{H}_0 , mais l'opérateur \hat{x} , quant à lui, aura toujours un spectre continu ... Il est plus naturel d'aborder le problème un peu différemment.

2. Discussion intuitive

Les fonctions $\phi_p(x) \sim e^{ipx/\hbar}$, $-\infty < p < \infty$, ne sont pas normalisables, mais tout comme dans l'exemple du puits infini, nous pouvons *superposer* de telles amplitudes de manière à obtenir des états "localisés" ! Au lieu de "sommer" sur les valeurs de n (puits infini ou boîte) nous intégrons sur les valeurs de p i.e.

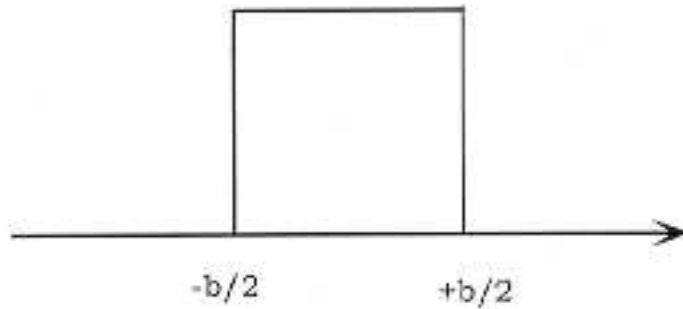
$$\phi(x) = \int c(p) e^{ipx/\hbar} dp \quad (5.32)$$

(mathématiquement, nous avons une "transformée de Fourier" plutôt qu'une série de Fourier).

Les "coefficients" c_n d'un développement en séries deviennent ici une fonction $c(p)$. Cette fonction (la transformée de Fourier de $\phi(x)$) est donnée par

$$c(p) \sim \int \phi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (5.33)$$

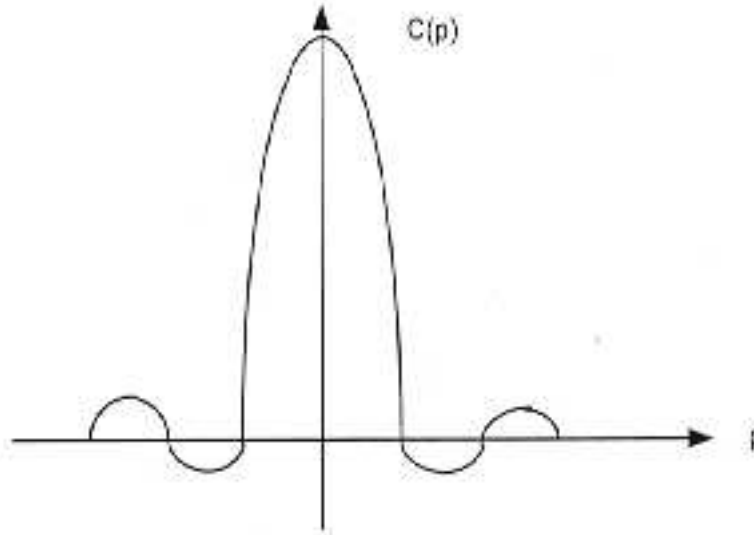
Pour fixer les idées, prenons à nouveau une fonction "rectangulaire" pour $\phi(x)$



dans ce cas

$$\begin{aligned} c(p) &\sim \int_{-b/2}^{b/2} e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{i\hbar}{p} \left(e^{-ipb/2\hbar} - e^{ipb/2\hbar} \right) \\ &\sim \frac{2\hbar}{p} \sin pb/2\hbar \end{aligned} \quad (5.34)$$

c'est-à-dire



De l'équation (5.34) ou de la figure $c(p)$ en fonction de p , il est clair que $\phi(x)$ (eq. (5.32)) reçoit des contributions égales en valeur absolue pour des p positifs ou négatifs. L'impulsion moyenne de la particule décrite par cette amplitude sera nulle et ce n'est pas vraiment ce que nous cherchons !

Essayons plutôt une amplitude de probabilité de la forme $\phi(x) = 0$ $x \leq -\frac{b}{2}$ et $x \geq \frac{b}{2}$ et

$$\phi(x) = e^{ip_0 x / \hbar} \quad -\frac{b}{2} \leq x \leq \frac{b}{2} \quad (5.35)$$

(justifiez ce choix !!).

Notez que $|\phi(x)|^2$ est toujours “rectangulaire” mais le facteur de phase va être crucial. L'éq. (5.33) donne à présent

$$c(p) \sim \frac{\sin(p - p_0)b/2\hbar}{(p - p_0)/2\hbar} \quad (5.36)$$

on a encore une fonction du type $\frac{\sin \theta}{\theta}$ mais elle est à présent centrée autour de la valeur $p = p_0$.

Nous avons construit un “paquet d'ondes” localisé dans un intervalle autour de $x = 0$ par superposition “d'états propres” de l'impulsion $e^{ipx/\hbar}$ modulée par une fonction $c(p)$ centrée autour de $p = p_0$.

L'impulsion moyenne pour une amplitude de probabilité donnée par l'éq. (5.32) avec $c(p)$ correspondant à l'éq. (5.36) est p_0 , tandis que la position moyenne est 0 et cette *amplitude de probabilité* est normalisable !

En d'autres mots, on peut très bien rester dans l'espace des fonctions normalisables et construire des “paquets” d'impulsion moyenne p_0 et/ou de position moyenne donnée.

La démarche esquissée ici est tout à fait “rigoureuse” : “impulsion précise” et/ou “position précise” sont vues comme des idéalizations dont on se rapproche par des “paquets” plus ou moins finement centrés autour d’une de ces valeurs “précises”.

Plutôt que de normaliser dans une boîte ou de rester “rigoureux” nous allons adopter un point de vue beaucoup plus pragmatique que nous allons à présent esquisser.

En gros, nous allons continuer à utiliser des “états propres” tels que $e^{ipx/\hbar}$ mais nous allons fixer les règles de leur utilisation.

3. Intermède : la distribution δ de Dirac

Le symbole de Kronecker δ_{ij} apparaît dans les relations d’orthonormalité des états propres d’un opérateur hermitien dont le spectre est *discret*. Il est défini pour des indices entiers i et j :

$$\begin{aligned}\delta_{ij} &= 0 & \text{si } i \neq j \\ \delta_{ii} &= 1\end{aligned}\tag{5.37}$$

Il en résulte que pour une fonction définie sur les entiers

$$f(j) = \sum_{i=1}^{\infty} \delta_{ij} f(i)\tag{5.38}$$

et, en particulier,

$$1 = \sum_{i=1}^{\infty} \delta_{ii}\tag{5.39}$$

Suivant Dirac nous introduisons un symbole $\delta(x, y)$ qui généralise le symbole de Kronecker pour des indices “continus”. En particulier, l’analogie de (5.38)

$$f(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x, y) f(x) dx\tag{5.40}$$

implique que $\delta(x, y)$ ne dépend que de la différence $x - y$ puisque

$$f(y + a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x + a, y + a) f(x + a) dx.$$

Nous utiliserons dorénavant le symbole $\delta(x - y)$ et nous obtenons immédiatement les propriétés

$$\delta(x - y) = 0 \quad \text{si } x \neq y\tag{5.41}$$

$$\delta(-x) = \delta(x)\tag{5.42}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - y) dx = 1.\tag{5.43}$$

Dans le contexte des transformées de Fourier

$$g(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iux} f(x) dx$$

on démontre que

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ivx} g(v) dv$$

dès lors

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iv(y-x)} f(y) dy dv \quad (5.44)$$

et nous obtenons une première “représentation” du symbole δ , à savoir

$$\delta(x - y) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iu(x-y)} du. \quad (5.45)$$

Toutes les manipulations qui précèdent sont très peu “rigoureuses”. Elles se justifient dans un contexte mathématique précis à savoir la “théorie des distributions”. En ce qui nous concerne ici, la règle pratique suivante suffit largement : toutes les manipulations, identités ou définitions impliquant le symbole δ doivent être comprises comme étant effectuées sur une fonction au “bon” comportement (qui s’annule suffisamment vite à l’infini) et sous un signe d’intégration.

La relation (5.45) va manifestement nous être utile pour définir les “relations d’orthonormalité” des états propres de l’impulsion. En effet :

$$\phi_p(x) \propto e^{ipx/\hbar}$$

et dès lors

$$\int \phi_p^*(x) \phi_{p'}(x) dx \propto \delta(p - p') \quad (5.46)$$

et par conséquent nous avons atteint notre but à savoir continuer à utiliser des états propres “non normalisables” mais en fixant les règles d’utilisation. Nous serons plus précis concernant les facteurs de proportionnalité de l’éq. (5.46) dans un moment.

Le symbole $\delta(x)$ n’est évidemment pas une fonction dans le sens ordinaire de ce terme. $\delta(x)$ est nul partout sauf en $x = 0$ et là $\delta(x)$ diverge mais de telle sorte que $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$. Il est utile de construire des séries de fonctions qui “tendent” vers la fonction $\delta(x)$. En voici quelques exemples

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2}} \exp -\frac{x^2}{\epsilon} \quad (5.47)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\sin Nx}{x} \quad (5.48)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{x^2 + \epsilon^2} \quad (5.49)$$

Ce que ces “représentations” de δ signifient précisément est que pour toute fonction suffisamment “gentille”, $g(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)g(x)dx = g(0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\epsilon g(x)}{x^2 + \epsilon^2} dx, \quad \text{etc ...}$$

En utilisant ces représentations, il est assez simple de vérifier qu’on peut “dériver la fonction δ' et donc définir la distribution

$$\delta'(x) = \frac{d}{dx}\delta(x) \quad (5.50)$$

et ainsi de suite.

Pour terminer cet intermède nous énonçons quelques propriétés de δ qui nous seront utiles dans la suite

$$(1) \quad x\delta(x) = 0$$

$$(2) \quad \delta(x) + x\delta'(x) = 0 \text{ (obtenue en dérivant la relation précédente)}$$

$$(3) \quad \delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$$

$$(4) \quad \text{si } g(x) \text{ est une fonction qui s'annule en } x_1, x_2 \dots x_N \text{ (zéros simples) alors } \delta(g(x)) = \sum_{i=1}^N \frac{\delta(x - x_i)}{|g'(x_i)|}$$

$$(5) \quad f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a).$$

Cette dernière propriété nous fournit la réponse à une question soigneusement évitée jusqu’à présent, à savoir quels sont les “états propres” de l’opérateur position \hat{x} ?

$$\hat{x}\delta(x - a) = x\delta(x - a) = a\delta(x - a) \quad (5.51)$$

et par conséquent $\delta(x - a)$ est la “fonction propre” de \hat{x} correspondant à la valeur propre a .

4. Le spectre continu

Nous avons à présent tous les “outils” mathématiques pour traiter le spectre continu en analogie complète avec le spectre discret et les “règles du jeu” sont particulièrement simples :

- on “orthonormalise” à la δ Dirac au lieu de δ Kronecker
- on remplace des sommes par des intégrales

et toutes les formules du § 3 restent valables. Pour fixer les idées considérons explicitement l'opérateur "impulsion".

Les "états propres" de l'impulsion sont donnés par

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (5.52)$$

(le facteur constant $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ sera justifié dans un instant) et le spectre de \hat{p} varie de $-\infty$ à $+\infty$.

Un état physique sera toujours supposé normalisable, c'est-à-dire

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx < \infty.$$

La représentation de cet état physique en terme des états propres de \hat{p} est donnée par l'intégrale de Fourier

$$\phi(x) = \int dp \chi(p) \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} = \int dp \chi(p) u_p(x) \quad (5.53)$$

(5.53) correspond bien à une superposition linéaire d'états propres de \hat{p} et est l'analogie de l'éq. (5.17).

Les "coefficients" du développement Eq. (5.18) sont devenus une fonction $\chi(p)$ qui est à présent déterminée par la transformée de Fourier "inverse" à savoir

$$\chi(p) = \int dx \frac{e^{-ipx}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \phi(x) = \int dx u_p^*(x) \phi(x) \quad (5.54)$$

qui correspond à l'éq. (5.18) du cas discret.

Ces équations (5.52) et (5.53) sont évidemment des résultats fondamentaux et, répétons-le encore une fois, elles sont les analogues dans le cas d'un spectre (purent) continu des formules (5.17) et (5.18) qui sont valables dans le cas d'un spectre purement discret.

En substituant (5.53) dans (5.54), nous obtenons les "relations d'orthonormalité"

$$\int u_p^*(x) u_{p'}(x) dx = \delta(p - p') \quad (5.55)$$

ce qui justifie le facteur $(2\pi\hbar)^{-1/2}$ dans la définition de $u_p(x)$.

La valeur moyenne de l'impulsion dans l'état (5.53) se calcule aisément avec pour résultat

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dp \, p |\chi(p)|^2. \quad (5.56)$$

De ce résultat nous concluons que, pour un système quantique dans l'état $\phi(x)$ (normalisé), la probabilité de mesurer une impulsion comprise entre p et $p + dp$ est donnée par

$$|\chi(p)|^2 dp = \int dx u_p^*(x) \phi(x) \int dx u_p(x) \phi(x) dp. \quad (5.57)$$

(Notez que si $\int |\phi(x)|^2 dx = 1$ alors $\int dp |\chi(p)|^2 = 1$: c'est la formule de Plancherel).

La solution générale de l'équation de Schrödinger libre, $\Psi(x, t)$, se construit comme dans le cas discret à savoir $\Psi(x, 0)$ supposé donné peut se développer en états propres de $\frac{\hat{p}^2}{2m}$, et, manifestement

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} u_p(x) = E_p u_p(x) \quad (5.58)$$

où

$$E_p = \frac{p^2}{2\mu} \quad (5.59)$$

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \chi(p) e^{ipx/\hbar} \quad (5.60)$$

et

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \chi(p) e^{ipx/\hbar} e^{-iE_p t/\hbar} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \chi(p) e^{i(px - E_p t)/\hbar}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Remarquons au passage que le spectre de $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}$ est donné par $E_p = \frac{p^2}{2\mu}$; $0 \leq E_p < \infty$. Chaque valeur propre E_p est doublement dégénérée : $u_p(x)$ et $u_{-p}(x)$ sont deux états propres de \hat{H}_0 , linéairement indépendants et orthogonaux, correspondant à la même valeur propre E_p .

Exercice : Soit $u_E^{(1)} = \alpha u_p(x)$ et $u_E^{(2)} = \beta u_{-p}(x)$. Calculez α et β pour que

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_E^{*(i)}(x) u_{E'}^j(x) dx = \delta^{ij} \delta(E - E') \quad (5.62)$$

5. La relation de fermeture

Pour l'oscillateur harmonique à une dimension, nous avons montré que

$$\phi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x) \quad \text{avec} \quad c_n = \int dx \phi_n^*(x) \phi(x)$$

où les $\phi_n(x)$ sont les vecteurs propres de \hat{H} . Dès lors

$$\phi(x) = \int dy \sum_n \phi_n^*(y) \phi_n(x) \phi(y) \quad (5.63)$$

et, par définition de la fonction δ , (5.63) est équivalent à

$$\sum_n \phi_n^*(y) \phi_n(x) = \delta(y - x). \quad (5.64)$$

Pour les états propres de l'impulsion, nous avons, de même

$$\frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{ip(y-x)/\hbar} = \delta(y - x). \quad (5.65)$$

Les relations (5.64) et (5.65) sont appelées des relations de “fermeture” : elles expriment le fait que les $\phi_n(x)$ ou les $u_p(x)$ sont effectivement des *bases* de l'espace de Hilbert.

Chapitre VI

Les relations d'incertitude

I Commutation d'opérateurs

Un des résultats importants établis dans les chapitres précédents concerne la mesure d'une observable \hat{A} : une valeur précise a de cette observable est obtenue uniquement dans le cas où a est une valeur propre et où le système est dans l'état propre correspondant. Dès lors si on considère 2 observables \hat{A} et \hat{B} il ne sera possible d'obtenir des valeurs précises lors d'une mesure de \hat{A} et d'une mesure concomitante de \hat{B} que sous la condition d'avoir un système dans un état propre *simultané* de l'opérateur \hat{A} et de l'opérateur \hat{B} . On dira que deux observables \hat{A} et \hat{B} sont *compatibles* si elles sont "simultanément mesurables" ou, plus précisément si elles possèdent un système complet *commun* de fonctions propres (ou d'états propres).

Dans ces conditions, chaque fonction propre peut être indicée par les valeurs propres correspondantes des deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} :

$$\hat{A}\phi_{a_i,b_j} = a_i\phi_{a_i,b_j} \quad (6.1)$$

$$\hat{B}\phi_{a_i,b_j} = b_j\phi_{a_i,b_j} \quad (6.2)$$

Dès lors

$$\hat{B}\hat{A}\phi_{a_i,b_j} = \hat{B}a_i\phi_{a_i,b_j} = b_ja_i\phi_{a_i,b_j}$$

et, de même

$$\hat{A}\hat{B}\phi_{a_i,b_j} = a_ib_j\phi_{a_i,b_j}.$$

Par conséquent

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\phi_{a_i,b_j} = 0 \quad (6.3)$$

et comme les états ϕ_{a_i,b_j} constituent une base de l'espace de Hilbert l'équation (6.3) est valable pour tout état physique (combinaison linéaire des ϕ_{a_i,b_j}) et il en résulte

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0 = [\hat{A}, \hat{B}] \quad (6.4)$$

Une condition *nécessaire* de la compatibilité de deux opérateurs est qu'ils commutent. Réciproquement on peut démontrer que si deux opérateurs \hat{A} et \hat{B} commutent il est possible de construire un système complet de fonctions propres communes à ces opérateurs. La démonstration ne sera pas donnée ici.

Nous avons déjà rencontré quelques exemples d'opérateurs qui commutent : $[\frac{\hat{p}^2}{2m}, \hat{p}] = 0$, $[P, \hat{H}_{Harm}] = 0$ où P est l'opérateur parité et \hat{H}_{Harm} l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique (à une ou à deux dimensions). Vu l'importance des relations de commutation, il est bon de se familiariser avec quelques règles élémentaires de ces "algèbres d'opérateurs".

Nous en donnons quelques unes qui se vérifient aisément

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{A}] &= 0 \\ [\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}] \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \\ [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \\ [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] &= 0 \quad (\text{identité de Jacobi}) \end{aligned}$$

Si \hat{A} et \hat{B} sont deux opérateurs qui chacun commute avec leur commutateur i.e. si $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$, alors

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$$

et

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}].$$

Une application utile de ces dernières relations ($\hat{A} = \hat{p}, \hat{B} = \hat{x}^n$) est donnée par

$$[\hat{p}, \hat{x}^n] = -i\hbar n\hat{x}^{n-1}.$$

Plus généralement si $f(\hat{x})$ est une fonction "raisonnable"

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar \frac{df(\hat{x})}{d\hat{x}} \quad (6.5)$$

de même

$$[\hat{x}, g(\hat{p})] = i\hbar \frac{dg(\hat{p})}{d\hat{p}}. \quad (6.6)$$

Une fonction opératorielle que l'on rencontre souvent en mécanique quantique est l'exponentielle d'un opérateur $e^{\hat{A}}$ définie par

$$e^{\hat{A}} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{1} + \hat{A} + \frac{1}{2!}\hat{A}^2 + \frac{1}{3!}\hat{A}^3 + \dots$$

On peut alors vérifier l'identité suivante

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{3!}[\hat{A}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \quad (6.7)$$

En effet soit

$$\begin{aligned} f(\lambda) &= e^{\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{-\lambda\hat{A}} \quad (\lambda \in \mathbb{C}) \\ \frac{df(\lambda)}{d\lambda} &= [\hat{A}, f(\lambda)] \end{aligned}$$

et de même

$$\frac{d^2f(\lambda)}{d\lambda^2} = [\hat{A}, [\hat{A}, f(\lambda)]]$$

et ainsi de suite. Un développement de Taylor autour de $\lambda = 0$ donne alors le résultat (6.7) puisque $f(0) = \hat{B}$ et que $f(1)$ est le membre de gauche de l'éq. (6.7).

Si \hat{A} et \hat{B} commutent avec leur commutateur,

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \quad (6.8)$$

etc ...

II Les relations d'incertitude de Heisenberg

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que pour des observables \hat{A} et \hat{B} qui commutent, il existe des états propres communs à ces observables. Il en résulte qu'une mesure "précise" de \hat{A} et de \hat{B} est en principe possible. Plus précisément si $\phi_{a,b}(x)$ est un état propre de \hat{A} et de \hat{B} de valeurs propres a et b (que nous supposons non dégénérées) alors

$$\hat{A}\phi_{a,b} = a\phi_{a,b} \quad \hat{B}\phi_{a,b} = b\phi_{a,b}.$$

Un état physique dont l'amplitude de probabilité est donnée par $\phi_{a,b}$ est un état pour lequel une mesure de \hat{A} et/ou de \hat{B} donnera toujours pour résultat a et/ou b :

$$\langle \hat{A} \rangle_{a,b} = \int \phi_{a,b}^*(x) \hat{A} \phi_{a,b}(x) dx = a \quad (6.9)$$

$$\langle \hat{B} \rangle_{a,b} = \int \phi_{a,b}^*(x) \hat{B} \phi_{a,b}(x) dx = b \quad (6.10)$$

$$(\Delta \hat{A})_{a,b} = \int \phi_{a,b}^*(x) (\hat{A} - a)^2 \phi_{a,b}(x) dx = 0 \quad (6.11)$$

$$(\Delta \hat{B})_{a,b} = \int \phi_{a,b}^*(x) (\hat{B} - b)^2 \phi_{a,b}(x) dx = 0. \quad (6.12)$$

Par contre si \hat{A} et \hat{B} ne commutent pas, il est impossible de trouver un état physique pour lequel une mesure de \hat{A} et une mesure de \hat{B} donneraient des valeurs précises. Nous définissons l'opérateur hermitien \hat{C} par la relation

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \quad (6.13)$$

Le théorème d'Heisenberg (ou les relations d'incertitude de Heisenberg) est l'assertion que de la relation (6.13) il suit que

$$(\Delta\hat{A})(\Delta\hat{B}) \geq \frac{1}{2}|\langle C \rangle| \quad (6.14)$$

soit encore que le produit des incertitudes dans la mesure des observables \hat{A} et \hat{B} est toujours plus grand (ou égal) à la moitié de la valeur absolue de la valeur moyenne du commutateur de \hat{A} et \hat{B} !

Pour démontrer l'inégalité (6.14) nous avons besoin du

Lemme de Schwartz : si f et g sont deux fonctions de carré sommable,

$$\left(\int_{-\infty}^{+\infty} |f|^2 dx \right) \left(\int_{-\infty}^{+\infty} |g|^2 dx \right) \geq \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f^* g dx \right|^2 \quad (6.15)$$

Pour démontrer ce lemme nous partons de l'inégalité

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (f + \lambda g)^* (f + \lambda g) dx \geq 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{C} \quad (6.16)$$

Soit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f|^2 dx + \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} f^* g dx + \lambda^* \int_{-\infty}^{+\infty} g^* f dx + |\lambda|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |g|^2 dx \geq 0 \quad (6.17)$$

Comme cette inégalité est valable pour tout nombre complexe λ , elle le sera pour

$$\lambda = - \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} g^* f dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |g|^2 dx}. \quad (6.18)$$

En substituant (6.18) dans (6.17) nous obtenons (6.15) et le lemme de Schwartz est donc démontré. Notez que l'inégalité de Schwartz devient une égalité si et seulement si les fonctions de carré sommable $f(x)$ et $g(x)$ sont proportionnelles.

Avec (6.15) il est à présent aisé de démontrer le théorème de Heisenberg. Puisque l'opérateur \hat{A} est hermitien

$$(\Delta\hat{A})^2 = \int (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \phi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \phi dx = \int \left| (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \phi(x) \right|^2 dx$$

et de même pour $(\Delta\hat{B})^2$. L'inégalité de Schwartz avec $f = (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \phi(x)$ et $g = (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \phi(x)$ donne alors

$$(\Delta\hat{A})^2 (\Delta\hat{B})^2 \geq \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \phi dx \right|^2 \quad (6.19)$$

où, rappelons le, l'inégalité ne devient une égalité que lorsque

$$(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)\phi = \alpha(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)\phi \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (6.20)$$

D'autre part

$$\begin{aligned} (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) &= \frac{1}{2} \left\{ (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) + (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \right\} + \frac{1}{2} iC \\ &= F + \frac{1}{2} iC \end{aligned} \quad (6.21)$$

où F et C sont des opérateurs hermitiens dont les valeurs moyennes sont par conséquent réelles. Avec (6.21) l'équation (6.19) devient

$$(\Delta \hat{A})^2 (\Delta \hat{B})^2 \geq \langle F \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle C \rangle^2 \geq \frac{1}{4} \langle C \rangle^2 \quad (6.22)$$

et le théorème d'Heisenberg est donc démontré. Remarquons que dans (6.22) on n'aura une égalité que si

$$\langle F \rangle = 0. \quad (6.23)$$

Dans le cas particulier où $\hat{A} = \hat{x}$ et $\hat{B} = \hat{p}$, nous avons

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar 1$$

et l'éq. (6.22) donne alors

$$(\Delta \hat{x})(\Delta \hat{p}) \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (6.24)$$

c'est-à-dire la "relation d'incertitude" de Heisenberg !

A ce stade, il est particulièrement intéressant de spécifier l'état physique pour lequel l'éq. (6.20) devient une *égalité* : pour un tel état le produit des incertitudes de "position et d'impulsion" est minimal.

En vertu de l'éq. (6.20), nous avons, pour un tel état "d'incertitude minimum", $\phi_{min.}(x)$

$$\int \phi_{min.}^* (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \right) \phi_{min.} dx = \alpha (\Delta \hat{x})^2 \quad (6.25)$$

et

$$\int \phi_{min.}^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \langle \hat{p} \rangle \right) (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle) \phi_{min.} dx = \frac{1}{\alpha} (\Delta \hat{p})^2 \quad (6.26)$$

mais, comme $\langle F \rangle_{min.} = 0$, nous devons avoir

$$\alpha (\Delta \hat{x})^2 + \frac{1}{\alpha} (\Delta \hat{p})^2 = 0. \quad (6.27)$$

Par ailleurs, en soustrayant (6.26) de (6.25)

$$\alpha (\Delta \hat{x})^2 - \frac{1}{\alpha} (\Delta \hat{p})^2 = i\hbar \quad (6.28)$$

et par conséquent, nous obtenons

$$\alpha = \frac{i\hbar}{2(\Delta\hat{x})^2}. \quad (6.29)$$

Dès lors, l'équation (6.20) devient

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - \langle\hat{p}\rangle\right)\phi_{min.}(x) = \frac{i\hbar}{2(\Delta\hat{x})^2}(\hat{x} - \langle x\rangle)\phi_{min.}(x) \quad (6.30)$$

dont la solution normalisée est donnée par

$$\phi_{min.}(x) = \left(2\pi(\Delta\hat{x})^2\right)^{-\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{(x - \langle x\rangle)^2}{4(\Delta\hat{x})^2} + \frac{i\langle\hat{p}\rangle x}{\hbar}\right\} \quad (6.31)$$

(nous avons utilisé $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp -ax^2 dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$).

Remarquez que le niveau fondamental de l'oscillateur harmonique a une amplitude de probabilité de la forme (6.31) avec $\langle\hat{x}\rangle = \langle\hat{p}\rangle = 0$!

Exercice Dérivez les “relations d'incertitude” énergie position à partir de $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$ et $[\hat{x}, \hat{H}] = i\hbar\frac{\hat{p}}{m}$.

Construisez l'amplitude de probabilité qui minimise ces relations d'incertitude !

Il est impossible de surestimer l'importance conceptuelle des relations d'incertitude de Heisenberg comme nous l'avons déjà signalé dans le chapitre II. En pratique, elles servent surtout à estimer des ordres de grandeur et donc à développer l'intuition physique des phénomènes quantiques.

III Evolution au cours du temps

Il est intéressant de décrire à présent l'évolution dans le temps d'une amplitude de probabilité dont l'incertitude “position impulsion” est minimale.

Pour une particule libre $\psi(x, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ et nous avons vu dans le chapitre V comment résoudre cette équation une fois que l'on se donne l'amplitude de probabilité au temps $t = 0$. Avec $\Psi(x, 0)$ donné par l'équation (6.31) on obtient dans le cas présent :

$$\Psi(x, t) = \left[2\pi(\Delta\hat{x})_0^2\right]^{-\frac{1}{4}} \left[1 + \frac{i\hbar t}{2(\Delta\hat{x})_0^2 m}\right]^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{\frac{-x^2}{4(\Delta\hat{x})_0^2} + ik_0 x - \frac{ik_0^2 \hbar t}{2m}}{1 + \frac{i\hbar t}{2(\Delta\hat{x})_0^2 m}}\right\} \quad (6.32)$$

où $k_0 = \hbar\langle\hat{p}\rangle$, $(\Delta\hat{x})_0$ est l'incertitude en x à l'instant $t = 0$ et $\langle\hat{x}\rangle = 0$. Par construction $(\Delta\hat{x})_0(\Delta\hat{p})_0 = \frac{1}{2}\hbar$. A l'instant $t = 0$ nous retrouvons bien l'éq. (6.31) et en particulier

$$|\Psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\Delta\hat{x})_0^2}} \exp\left\{\frac{-x^2}{2(\Delta\hat{x})_0^2}\right\} \quad (6.33)$$

c'est-à-dire une distribution gaussienne centrée en $x = 0$ et de largeur caractéristique $(\Delta\hat{x})_0$. Au cours du temps ($t > 0$), l'éq. (6.32) permet de mettre en évidence trois phénomènes physiquement importants à savoir :

- a) le centre de la distribution de probabilité se déplace de $x = 0$ à $x = \frac{\hbar k_0 t}{m}$. En effet, la dépendance en x de $|\Psi(x, t)|^2$ est de la forme

$$\exp - \frac{\left(x - \frac{\hbar k_0 t}{m}\right)^2}{2(\Delta\hat{x})_t^2} \quad (6.34)$$

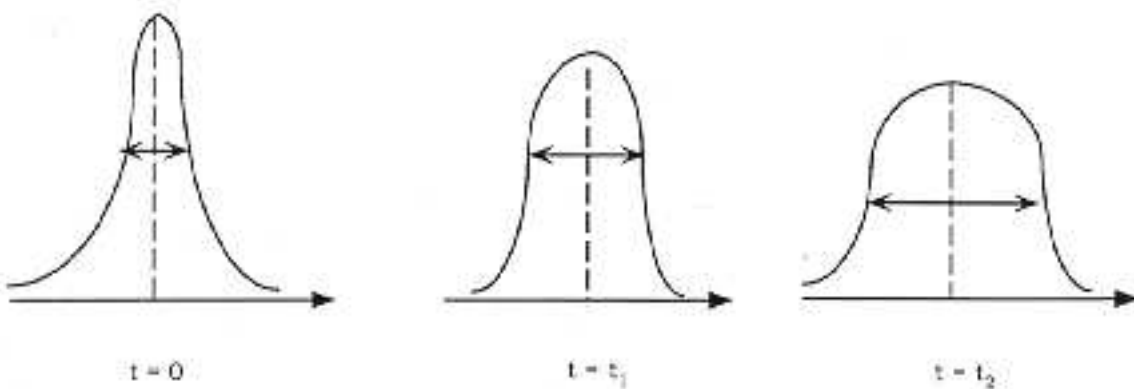
- b) la largeur caractéristique croît en fonction du temps

$$(\Delta\hat{x})_t^2 = (\Delta\hat{x})_0^2 \left[1 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m(\Delta\hat{x})_0^2} \right] \quad (6.35)$$

En particulier plus $(\Delta\hat{x})_0$ est petit, plus l'élargissement de la distribution de probabilité sera rapide (expliquez intuitivement ce résultat)

- c) la hauteur de la distribution ((i.e. la valeur maximale de $|\Psi(x, t)|^2$) décroît au cours du temps de manière à maintenir la conservation de la probabilité i.e. $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$ (pour tout t).

En d'autres mots une amplitude de probabilité initialement d'incertitude minimale se "disperse" et s'étale et l'incertitude croît. Graphiquement nous avons



Il est bon de se rappeler la signification physique de $\Psi(x, t)$: à tout instant t_1 fixé, la distribution spatiale $|\Psi(x, t_1)|^2$ décrit ce que serait le résultat d'une série de mesures de la position sur un ensemble de particules quantiques toutes préparées dans le même état initial $\Psi(x, 0)$; la mesure est supposée avoir été effectuée au temps t_1 après la préparation du système au temps $t = 0$. De même $|\Psi(x, t_2)|^2$ avec $t_2 > t_1$ décrit le résultat d'une série de mesures

effectuées au temps t_2 sur un autre ensemble de particules préparées dans le même état $\Psi(x, 0)$ au temps $t = 0$ mais dont on n'a pas mesuré la position au temps t_1 . Le “mouvement” de l'amplitude de probabilité permet de décrire (et de prédire) les variations au cours du temps des distributions de probabilité auxquelles les particules quantiques se conformeront !

De ce qui précède et des développements du chapitre V il résulte que nous pouvons à présent explicitement calculer (au moins dans le cas de la particule libre) les amplitudes $A(x, t; x_0, 0)$ définies au chapitre II. (Ceci n'a évidemment rien d'étonnant : après tout l'équation de Schrödinger a été dérivée du comportement “global” de $A(x, t; x_0, 0)$). A partir de l'équation aux valeurs propres

$$\hat{H}\phi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_E(x) = E\phi_E(x)$$

nous obtenons une *base* $\phi_E(x)$ de l'espace de Hilbert. Dès lors $\Psi(x, 0) = \int_0^\infty dE c(E)\phi_E(x)$ où $c(E) = \int \phi_E^*(y)\Psi(y, 0)dy$ et $\Psi(x, t) = \int dE c(E)\phi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$. Soit encore

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= \int dE dy \phi_E^*(y)\phi_E(x) \exp(-iEt/\hbar)\Psi(y, 0) \\ &= \int dy A(x, t; y, 0)\Psi(y, 0)dy\end{aligned}$$

et par conséquent

$$A(x, t; y, 0) = \int dE \phi_E^*(y)\phi_E(x) \exp \frac{-i}{\hbar}Et. \quad (6.36)$$

La relation de fermeture implique que $A(x, 0; y, 0) = \delta(x - y)$: au temps $t = 0$ la particule se trouve exactement au point y puisque $\delta(x - y)$ est un “vecteur propre” de l'opérateur position \hat{x} de valeur propre y

$$\hat{x}\delta(x - y) = x\delta(x - y) = y\delta(x - y).$$

L'expression (6.36) se calcule explicitement et donne

$$A(x, t; y, 0) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{1/2} \exp \frac{-m(x - y)^2}{2i\hbar t} \quad (6.37)$$

Pour terminer, nous pouvons également déterminer l'évolution au cours du temps de la valeur moyenne d'une observable \hat{A} (dont nous supposons qu'elle ne dépend pas explicitement de t)

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \int \Psi^*(x, t)\hat{A}\Psi(x, t)dx$$

et dès lors

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle_t}{dt} = \int \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \hat{A} \Psi(x, t) dx + \int \Psi^* \hat{A} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} dx$$

soit encore

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle_t}{dt} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle_t \quad (6.38)$$

(si \hat{A} dépend explicitement du temps, il faut ajouter le terme $\langle i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle_t$ dans le membre de droite de (6.38)).

Le résultat (6.38) est important à plus d'un titre : si l'observable \hat{A} commute avec l'hamiltonien \hat{H} , sa valeur moyenne $\langle \hat{A} \rangle$ est constante dans le temps et ce pour tout état $\Psi(x, t)$. L'observable physique représentée par l'opérateur \hat{A} est alors appelée une constante du mouvement et on dit qu'elle est conservée. Dans le cas d'une particule libre $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ et bien entendu $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$: l'impulsion d'une particule libre est une constante du mouvement et elle est conservée. Nous verrons des exemples moins triviaux dans le contexte de la mécanique quantique à 3 dimensions.

Une expression plus explicite mais moins transparente de l'éq. (6.38) est donnée par

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \int \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx = \sum_{k, \ell} c_k^* c_\ell \exp \frac{-i}{\hbar} (E_\ell - E_k) t \int \phi_k^*(x) \hat{A} \phi_\ell(x) dx$$

(la “sommation” sur les valeurs propres de l'hamiltonien doit être prise dans le sens du chapitre V !). On définit

$$\hat{A}_{k\ell} = \int \phi_k^*(x) \hat{A} \phi_\ell(x) dx$$

comme “l'élément de matrice de l'opérateur \hat{A} entre les états propres $\phi_\ell(x)$ et $\phi_k(x)$ de l'hamiltonien”.

$$\langle \hat{A} \rangle_t = \sum_k |c_k|^2 A_{kk} + \sum_{\substack{k, \ell \\ k \neq \ell}} c_k^* c_\ell \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar} (E_\ell - E_k) t \right\} A_{k\ell}. \quad (6.39)$$

Cette équation explicite la dépendance temporelle de $\langle \hat{A} \rangle_t$ et est extrêmement utile dans la pratique !

IV La relation d'étalement temps-énergie

Outre la relation d'Heisenberg $(\Delta \hat{x})(\Delta \hat{p}) \geq \frac{\hbar}{2}$, il existe également en mécanique quantique une “relation d'étalement temps-énergie” que nous écrivons sous la forme

$$\delta t \delta E \gtrsim \hbar \quad (6.40)$$

Cette relation est hélas souvent appelée une relation d'incertitude temps-énergie et, encore hélas, elle est quelquefois présentée comme le “complément relativiste” de la relation

d'Heisenberg. Et cette nomenclature et cette prétendue complémentarité relativiste sont *absolument incorrectes*. Vu l'importance phénoménologique de la relation (6.40), il est essentiel de bien comprendre et son origine et sa signification.

Tout d'abord, le *temps n'est pas une observable en mécanique quantique* ! Le temps est un paramètre en terme duquel on décrit et/ou prédit l'évolution d'un système quantique. Insistons sur ce point : le temps est un nombre (variable) au moyen duquel on paramétrise l'histoire d'un système quantique. Il permet de préciser l'instant particulier auquel on a mesuré l'une ou l'autre propriété du système quantique, mais, répétons-le, on ne mesure pas le temps en mécanique quantique !

La relation d'étalement (6.40) n'est donc pas une relation d'incertitude. D'autre part il est bon de souligner que dans une théorie quantique relativiste des champs (à 3 dimensions spatiales), les coordonnées de position et le temps sont effectivement mises sur le même pied (i.e. ce sont les composantes d'un quadrivecteur), mais le temps ne devient pas un opérateur : ce sont plutôt les coordonnées spatiales x, y, z qui perdent leur statut d'opérateur pour redevenir de simples paramètres comme t . \vec{x} et t indicent les points de l'espace-temps et ce sont les valeurs des *champs* en ces points qui sont les observables de la théorie.

Ceci dit quelle est la signification de l'éq. (6.40) ?

Elle relie le *taux de variation de l'état d'un système à l'étalement des valeurs de son énergie*.

Pour un état stationnaire $\delta E = 0$ puisque l'énergie d'un tel état est univoquement déterminée, mais par ailleurs les propriétés physiques d'un état stationnaire sont indépendantes du temps et par conséquent $\delta t = \infty$. Ces valeurs de δt et δE ne sont pas incompatibles avec l'éq. (6.40). Une vérification moins triviale de l'éq. (6.40) est donnée par une superposition de deux états stationnaires. Nous avons déjà discuté les propriétés d'un tel état dans le chapitre V. Si

$$\Psi(x, t) = c_1 \phi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \phi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

est l'amplitude de probabilité d'un état donné, les propriétés physiques de cet état - dérivées à partir d'expressions quadratiques en $\Psi(x, t)$ et $\Psi^*(x, t)$ auront une dépendance temporelle déterminée par l'exponentielle

$$e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar}.$$

Manifestement, pour des intervalles de temps $\delta t \ll \frac{\hbar}{|E_2 - E_1|}$, les propriétés physiques de notre système ne changeront guère. Pour que des changements significatifs des propriétés physiques de ce système se produisent, il faut nécessairement un étalement de temps $\delta t \gtrsim \frac{\hbar}{|E_2 - E_1|}$.

Mais par ailleurs, une mesure de l'énergie de ce système donne comme résultat E_1 ou E_2 .

L'étalement en énergie est donc de l'ordre $\delta E = (E_2 - E_1)$ et nous retrouvons bien la relation (6.40). Notez que $\delta E \simeq 2(\Delta \hat{H})$.

Une dérivation plus convaincante de (6.40) part de la relation (6.38). Si \hat{A} est une observable qui ne commute pas avec l'hamiltonien \hat{H} , la relation d'Heisenberg prend la forme

$$(\Delta \hat{A})(\Delta \hat{H}) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \right| \quad (6.41)$$

et en vertu de (6.38) cette relation peut encore s'écrire sous la forme

$$\frac{(\Delta \hat{A})}{\left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|} \cdot (\Delta \hat{H}) \gtrsim \frac{1}{2} \hbar \quad (6.42)$$

si on pose $\tau_A = \frac{\Delta \hat{A}}{\left| \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} \right|}$, (6.42) s'écrit donc $\tau_A(\Delta \hat{H}) \geq \frac{1}{2} \hbar$.

τ_A est un temps caractéristique de l'évolution de la distribution statistique de \hat{A} : c'est l'intervalle de temps nécessaire pour que le "centre" $\langle \hat{A} \rangle$ de la distribution statistique de \hat{A} se "déplace" d'une quantité égale à la largeur $(\Delta \hat{A})$. En d'autres mots τ_A est l'étalement dans le temps δt_A nécessaire pour que la distribution statistique de \hat{A} soit notablement modifiée. En prenant à nouveau $\delta E \sim 2(\Delta \hat{H})$ nous avons donc pour toute observable non conservée

$$\delta t_A \delta E \gtrsim \hbar$$

c'est-à-dire la relation (6.40).

L'application la plus importante de cette relation est dans le contexte de la désintégration d'un *état metastable*. Vu l'importance phénoménologique de ce sujet nous y consacrons le paragraphe suivant.

V Désintégration, temps de vie et largeur

1. Loi exponentielle de désintégration

Prenons, à titre d'exemple, un ensemble de noyaux radioactifs. Dans l'intervalle de temps Δt , une fraction ΔN de ces noyaux vont se désintégrer et pour Δt suffisamment petit

$$\Delta N = -\gamma N \Delta t \quad (6.43)$$

la constante γ représente le *taux de désintégration* c'est-à-dire la probabilité par unité de temps qu'un noyau se désintègre.

Si on intègre l'équation (6.43) on obtient

$$N(t) = N_0 e^{-\gamma t} \quad (6.44)$$

c'est-à-dire la loi exponentielle de désintégration qui caractérise un très grand nombre de processus aléatoires “à taux constant”.

Cette loi “classique” est remarquablement bien satisfaite phénoménologiquement (e.g. désintégration de l'uranium). Parmi les échelles de temps que l'on peut choisir pour étalonner le processus, il y a le *temps de vie moyen* τ défini par

$$\tau = \frac{1}{\gamma}. \quad (6.45)$$

L'analyse quantique d'un processus de désintégration est considérablement plus subtile et, à vrai dire, le résultat ne coïncide pas tout à fait avec l'exponentielle (en particulier pour des temps très très courts jusqu'à présent inobservables). Notre but ici n'est pas de discuter en détail les processus de désintégration mais plutôt d'en donner une image intuitive mais raisonnablement correcte dans le contexte de la mécanique quantique.

2. Etats stables et métastables

Dans le chapitre IV nous avons montré l'existence d'un certain nombre de solutions *stationnaires* de l'équation de Schrödinger : ce sont des solutions d'une *énergie* bien précise et nous avons distingué le cas du spectre discret (états liés) et le cas du spectre continu (états de diffusion). Comme prototypes physiques de ces états nous pouvons prendre un électron lié à un atome (spectre discret) ou un faisceau de protons sortant d'un accélérateur (spectre continu : les protons auront une énergie fixée mais quelconque).

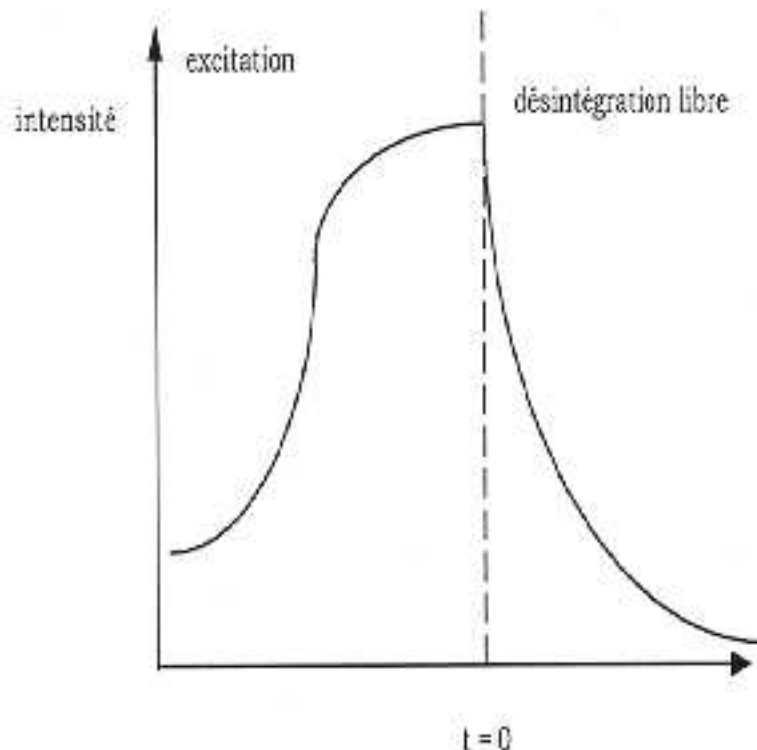
En fait, dans la nature il y a très peu d'états stationnaires dans le spectre discret ! Le niveau *fondamental* d'un électron lié à un atome est le niveau correspondant à l'énergie la plus basse (E_0) : ce niveau est (généralement) stable et mérite vraiment le nom d'état stationnaire. Laissé à lui-même, dans cet état fondamental, l'atome est d'une stabilité tout à fait remarquable et cette stabilité est d'ailleurs en accord parfait avec la mécanique quantique.

Mais ce niveau fondamental est essentiellement le seul état stationnaire de l'atome (nous ignorons les dégénérescences possibles qui ne nous concernent pas ici). Tous les autres états liés, d'énergies $\dots E_n, E_2 > E_1 > E_0$ vont “spontanément” se *désexciter* en émettant un ou plusieurs photons d'énergie $h\nu_{ij} \cong E_i - E_j$ et, au bout du compte se retrouveront dans l'état fondamental. Supposons par exemple qu'on prépare une population d'atomes dans le premier niveau excité : expérimentalement cette préparation se fait en bombardant les atomes avec des photons d'énergie $h\nu_{10} \cong E_1 - E_0$. Laissés à eux-mêmes dans l'état d'énergie E_1 ces atomes vont se désexciter en émettant des photons d'énergie $h\nu_{10}$. L'état d'énergie E_1 est appelé un état *métastable*. Il en va de même des “états liés” d'énergie $\dots E_n \dots E_2$.

Pouvons-nous décrire ce processus dans le contexte de la mécanique quantique non relativiste ? Strictement parlant, la réponse est non. Les processus d'absorption et d'émission d'un photon par un électron comme tous les processus de création et d'annihilation de particules ne peuvent se traiter que dans le contexte de la *théorie quantique de champs relativistes*. Dans ce contexte le *potentiel coulombien* qui lie l'électron à l'atome et les *processus d'émission et d'absorption de photons* sont intimement liés (de même que la *création d'une paire électron-positron* à partir d'un photon ou du processus inverse à savoir *annihilation d'une paire électron-positron* en un photon) : ce sont différentes facettes d'une seule et même interaction fondamentale à savoir l'interaction électromagnétique.

En mécanique quantique non relativiste, on traite le potentiel coulombien exactement mais on néglige les effets d'absorption et d'émission de photons de même que les créations et annihilations de paires. Dans cette approximation on peut quand même se poser (et résoudre approximativement) la question de savoir à quel taux les atomes excités vont “disparaître” c'est-à-dire se désexciter. En d'autres mots quels sont les *étalements de temps* (et donc, d'énergie !) caractéristiques du processus.

A titre d'exemple nous donnons ci-dessous un graphique correspondant à l'intensité de la radiation par l'ion Na_2^+ de photons de 3914 \AA



La courbe d'excitation (préparation dans un état excité) ne va pas nous intéresser ici mais

l'exponentielle décrivant la “désintégration libre” est ce que nous cherchons à modéliser en mécanique quantique non relativiste.

Mais avant de nous attaquer à ce problème il faut mentionner l'existence d'une deuxième catégorie d'états “métastables”, mais dans le spectre continu cette fois : ces états sont généralement appelés des “résonances” et jouent un rôle important en physique nucléaire et en physique des particules élémentaires. (Outre leur intérêt propre, les résonances en physique des particules élémentaires ont été, entre autres, à la base du modèle des quarks). Ces résonances sont en général observées dans des expériences de diffusion : pour certaines énergies le système projectile-cible est quasi-lié ou résonant ce qui veut dire qu'à ces énergies projectile et cible passent considérablement plus de temps “ensemble” que le temps nécessaire au projectile pour traverser la cible. Dans ce langage un état lié est une configuration où “projectile et cible” restent tout le temps “ensemble”. Dans un état quasi lié ou résonant il est à nouveau question d'*étalement dans le temps* (et donc d'énergie).

3. Largeur

Nous pouvons à présent faire usage de la relation (6.40) à savoir $\delta t \delta E \gtrsim \hbar$.

Une caractérisation naturelle – pour les états métastables aussi bien que pour les résonances – de l'étalement dans le temps δt est le temps de vie moyen τ . Dès lors

$$\delta E \gtrsim \frac{\hbar}{\tau} = \hbar\gamma. \quad (6.46)$$

L'ordre de grandeur du temps de vie moyen d'états atomiques métastables est de l'ordre de 10^{-7} sec (dans le spectre visible). De tels temps de vie sont *mesurables* : on excite une population d'atomes comme décrit précédemment et on observe la décroissance exponentielle de l'intensité de la radiation émise (voir figure). En vertu de (6.46) l'étalement d'énergie d'un état excité de l'atome est alors de l'ordre de

$$\delta E \gtrsim \frac{\hbar}{10^{-7}\text{sec}} \approx 10^{-8} \text{eV}. \quad (6.47)$$

Comme les énergies des photons (visibles) sont typiquement de l'ordre de quelques eV, le rapport $\frac{\delta E}{E} \approx 10^{-8}$. δE est proportionnel à la “largeur naturelle” de la raie spectrale et pour une raie dont la longueur d'onde est de 5000 \AA , celle-ci est de l'ordre de 0.0001 \AA . Moyennant des corrections dues à l'effet Doppler, cette largeur naturelle est observable.

En physique nucléaire, cette “largeur naturelle” est beaucoup plus apparente : un spectre de photons émis par des noyaux bombardés par des protons accélérés exhibe dans bien des cas des *résonances* dont l'étalement en énergie $\delta E \approx 1 \text{keV}$. En vertu de (6.40) le temps de

vie correspondant est alors de l'ordre de 10^{-19} sec (ce qui n'est pas directement mesurable). Un exemple est illustré ci-dessous

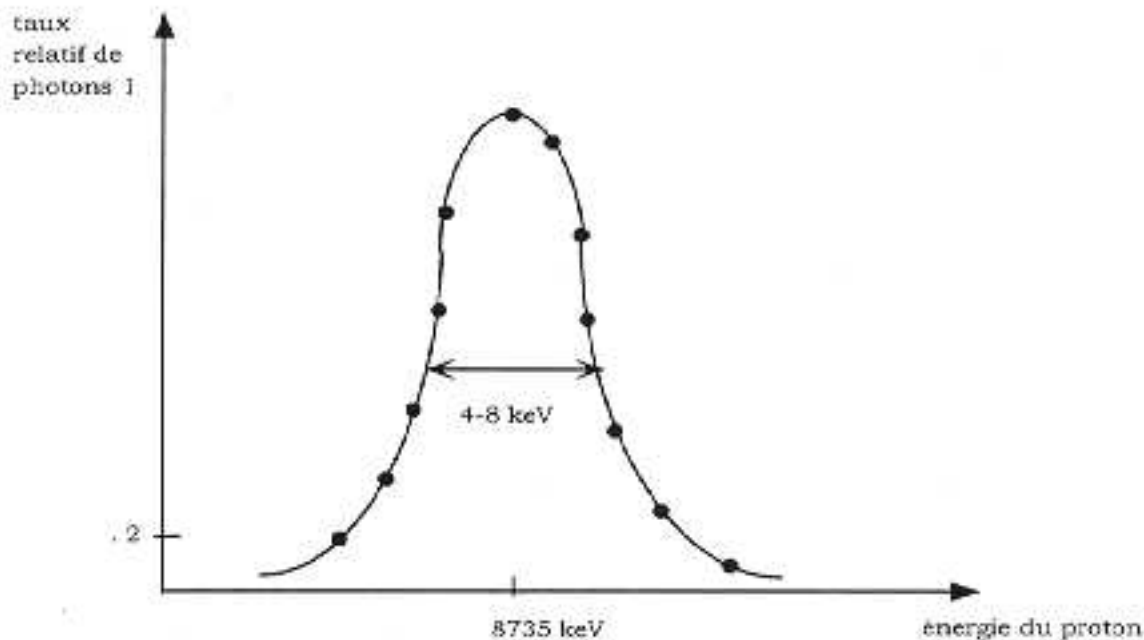


FIGURE 1

la “largeur” (ou l'étalement d'énergie) est ici $\hbar\gamma \simeq 4.8\text{keV}$. En physique des particules élémentaires on produit souvent dans des collisions des états dont l'étalement en masse est énorme et observable. Il s'agit ici de collisions “ultra relativistes” où les énergies en jeu sont de plusieurs GeV (sinon TeV) et, l'étalement de masse n'est rien d'autre qu'un étalement de l'énergie au repos ($E = mc^2$). Un exemple spectaculaire est la résonance ρ de masse ≈ 770 MeV et dont l'étalement en énergie δE (ou largeur) est de l'ordre de 100 MeV ! Le temps de vie d'une résonance comme le ρ est de l'ordre de 5×10^{-24} sec et ici nous nous approchons manifestement d'échelles de temps en deça desquelles la notion même “d'état quantique” perd toute signification !

4. Modélisation : la courbe de Breit-Wigner

Pour terminer, nous illustrons brièvement une modélisation de l'allure générale (forme et largeur) d'une raie spectrale à partir d'une amplitude de probabilité qui décrirait un état excité (métastable ou résonant).

Pour fixer les idées, nous considérons un atome dans un état excité dont l'énergie est E_1 . Dans l'approximation stationnaire, la dépendance en t de l'amplitude de probabilité de cet

état est

$$\Psi(t) \sim e^{-iE_1 t/\hbar}. \quad (6.48)$$

Nous voulons paramétriser la désintégration de cet état. De l'éq. (6.44) il résulte que nous devons avoir

$$|\Psi(t)|^2 \propto e^{-\gamma t} \quad (6.49)$$

en vertu de la signification probabiliste de $\Psi(t)$. Tenant compte de (6.48) et (6.49) nous sommes amenés à poser

$$\Psi(t) \propto e^{-\gamma t/2} e^{-iE_1 t/\hbar}. \quad (6.50)$$

L'analyse en énergie de (6.50) donne par transformation de Fourier

$$A_E \sim \int_0^\infty \Psi(t) e^{iEt/\hbar} dt \quad (6.51)$$

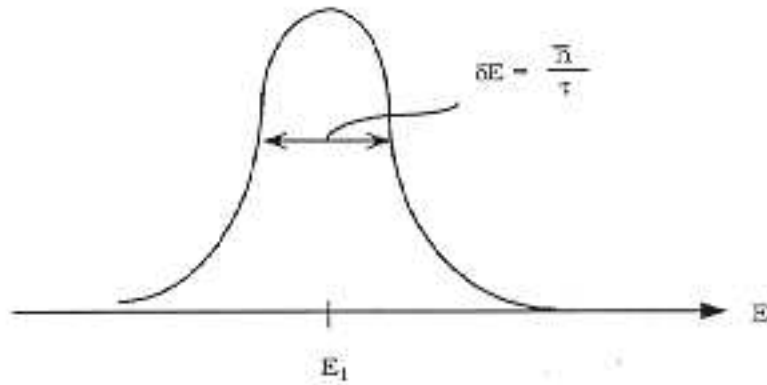
soit

$$A_E \sim \frac{1}{i\frac{(E-E_1)}{\hbar} - \gamma/2}. \quad (6.52)$$

De (6.52) nous pouvons calculer la distribution en énergie

$$|A_E|^2 \sim \frac{1}{\left(\frac{E-E_1}{\hbar}\right)^2 + (\gamma/2)^2} \sim \frac{1}{(E-E_1)^2 + (\hbar\gamma/2)^2}. \quad (6.53)$$

La courbe (6.53) est appelée une “Breit-Wigner”. Elle correspond à une courbe en “cloche” centrée en E_1 et dont la largeur i.e. l'étalement en énergie est donné par $\delta E = \hbar\gamma = \frac{\hbar}{\tau}$



Cette courbe de Breit-Wigner est une illustration des conséquences physiques des relations d'étalement énergie-temps. Malgré la dérivation grossière donnée ici cette courbe est une paramétrisation remarquable de tous les phénomènes impliquant des états métastables et/ou des résonances et les succès phénoménologiques de la courbe de Breit-Wigner sont impressionnants (la Figure 1 en est un bon exemple).

Chapitre VII

La mécanique quantique dans l'espace des impulsions

Les principes de la mécanique quantique non relativiste que nous avons illustré dans les chapitres précédents peuvent se résumer de la manière suivante :

- 1) L'état d'un système quantique à un instant donné t est *complètement* décrit par une amplitude de probabilité $\Psi(x, t)$
- 2) La densité de probabilité de trouver la particule au point x à l'instant t est donnée par $|\Psi(x, t)|^2$
- 3) Les observables “position” et “impulsion” sont données par des opérateurs hermitiens \hat{x} et \hat{p} , définis par

$$\begin{aligned}\hat{x} \Psi(x, t) &= x \Psi(x, t) \\ \hat{p} \Psi(x, t) &= -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}\end{aligned}$$

Ces observables *ne commutent pas*. De la relation de commutation $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar \mathbb{1}$, nous avons déduit la relation d'incertitude de Heisenberg $(\Delta \hat{p})(\Delta \hat{x}) \geq \frac{\hbar}{2}$.

- 4) L'évolution au cours du temps d'un système quantique, non perturbé par une mesure est donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t).$$

L'opérateur \hat{H} (l'hamiltonien) représente l'observable “énergie” et, dans le cas non relativiste, il s'écrit explicitement

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}).$$

- 5) Au cours de l'histoire d'un système quantique non relativiste, la probabilité est *conservée* (il n'y a pas de création ou d'annihilation de particules). Cette conservation

de la probabilité (formellement analogue à la conservation de la charge électrique en électrodynamique) s'exprime par

$$\frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} + \partial_x J(x, t) = 0 \quad (7.1)$$

où $J(x, t)$, le courant de probabilité, est donné par

$$J(x, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \Psi \right\}.$$

Il est extrêmement utile pour approfondir notre compréhension de ces principes d'examiner ce qu'ils deviennent en termes de la *transformée de Fourier* $\chi(p, t)$ de l'amplitude $\Psi(x, t)$.

Rappelons que pour toute fonction de carré sommable

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(p, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp \quad (7.2)$$

et, inversement

$$\chi(p, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, t) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} px\right\} dx. \quad (7.3)$$

$\Psi(x, t)$ et $\chi(p, t)$ sont les “transformées de Fourier” l'une de l'autre et la formule de Plancherel, à savoir

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\chi(p, t)|^2 dp \quad (7.4)$$

garantit que si l'une de ces fonctions est normalisée il en est de même pour l'autre. En vertu des formules (7.2) et (7.3), il y a équivalence complète entre “l'espace de Hilbert” des fonctions de carré sommable $\Psi(x, t)$ et “l'espace de Hilbert” des fonctions de carré sommable $\chi(p, t)$. Que deviennent les principes de la mécanique quantique quand on les exprime dans l'espace de Hilbert des $\chi(p, t)$? La réponse est limpide et s'obtient par usage systématique de (7.2) et (7.3) ainsi que des fonctions δ , qui rappelons-le sont définies par

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i}{\hbar} px\right) dp = \delta(-x) \quad (7.5)$$

$$\delta(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx = \delta(-p). \quad (7.6)$$

Considérons tout d'abord l'opérateur \hat{p}

$$\hat{p}\Psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int p \chi(p, t) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp \quad (7.7)$$

et d'autre part

$$\begin{aligned}
 p\chi(p, t) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \Psi(x, t) p \exp -\frac{i}{\hbar} px \, dx \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \Psi(x, t) \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\exp -\frac{ipx}{\hbar} \right) dx \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) \exp -\frac{ipx}{\hbar} dx \quad (\text{intégration par partie}). \quad (7.8)
 \end{aligned}$$

Par conséquent, dans l'espace des fonctions $\chi(p, t)$ l'opérateur \hat{p} est représenté par “la multiplication” par p i.e.

$$\hat{p}\chi(p, t) = p\chi(p, t) \quad (7.9)$$

ce qui est un premier résultat important. Il est aisé d'en déduire (ou de calculer explicitement) que

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) (-i\hbar) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = \int dp p |\chi(p, t)|^2. \quad (7.10)$$

En effet

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p} \rangle &= \int dx \Psi^*(x, t) (-i\hbar) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dx dp \Psi^*(x, t) p \chi(p, t) \exp \frac{ipx}{\hbar} \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dx dp dq \chi^*(q, t) p \chi(p, t) \exp \frac{i(p-q)x}{\hbar} \\
 &= \int dp dq \chi^*(q, t) p \chi(p, t) \delta(p-q) \\
 &= \int dp p |\chi(p, t)|^2.
 \end{aligned}$$

Pour éviter les confusions nous introduisons les expressions suivantes :

- “mécanique quantique dans l'espace de configuration” pour désigner la formulation des règles et principes de la mécanique quantique en termes d'amplitudes de probabilité $\Psi(x, t)$;
- “mécanique quantique dans l'espace des impulsions” pour désigner la formulation de la mécanique quantique en termes d'amplitudes de probabilité $\chi(p, t)$.

Considérons à présent l'opérateur \hat{x}

$$\begin{aligned}
 \hat{x}\Psi(x, t) &= x\Psi(x, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int \chi(p, t) x \exp \frac{ipx}{\hbar} dp \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \chi(p, t) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial p} \left(\exp \frac{ipx}{\hbar} \right) dx \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int i\hbar \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial p} \exp \frac{ipx}{\hbar} dx \quad (\text{intégration par partie})
 \end{aligned}$$

et d'autre part

$$i\hbar \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int x \Psi(x, t) \exp -\frac{ipx}{\hbar} dx.$$

Dès lors, dans l'espace des impulsions

$$\hat{x}\chi(p, t) = i\hbar \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial p}. \quad (7.11)$$

Et on vérifie comme précédemment que

$$\langle \hat{x} \rangle = \int dx x |\Psi(x, t)|^2 = \int dp \chi^*(p, t) (i\hbar) \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial p}. \quad (7.12)$$

Il est intéressant de calculer, dans l'espace des impulsions, le commutateur de \hat{x} et \hat{p}

$$\begin{aligned} (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\chi(p, t) &= \hat{x}p\chi(p, t) - \hat{p}(i\hbar) \frac{\partial \chi}{\partial p} \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} (p\chi(p, t)) - i\hbar p \frac{\partial \chi}{\partial p} = i\hbar \chi(p, t). \end{aligned} \quad (7.13)$$

Et nous retrouvons bien $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbf{1}$.

Résumons-nous : l'état d'un système quantique à un instant donné est complètement décrit par une amplitude de probabilité $\Psi(x, t)$ dans l'espace de configuration. Nous pouvons tout aussi bien considérer que l'état d'un système quantique est complètement décrit par une amplitude de probabilité $\chi(p, t)$ dans l'espace des impulsions. Ces deux descriptions complètes d'un état du système quantique sont reliées par les eqs. (7.2) et (7.3). La formule de Plancherel précise le sens de l'expression suivante : la probabilité de trouver la particule avec une impulsion p (à l'instant t est donnée par $|\chi(p, t)|^2$.

Les opérateurs \hat{x} et \hat{p} (position et impulsion) sont hermitiens et satisfont la relation de commutation $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \mathbf{1}$ quel que soit l'espace des fonctions dans lequel ils sont représentés !

Dans l'espace de configuration un état propre de \hat{p} , correctement "normalisé"

$$\hat{p} \phi(x) = p_0 \phi(x) \quad (7.14)$$

soit encore

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) = p_0 \phi(x) \quad \text{et} \quad \phi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ip_0 x / \hbar}. \quad (7.15)$$

Dans l'espace des impulsions, cet état propre de \hat{p} est donné par (7.3) et (7.6)

$$\rho(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \phi(x) \exp -\frac{i}{\hbar} p x dx = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{i(p_0 - p)x / \hbar} dx = \delta(p - p_0). \quad (7.16)$$

Inversément un état propre de \hat{x} défini par

$$\hat{x} \phi(x) = x_0 \phi(x) \quad (7.17)$$

est donné, dans l'espace de configuration par

$$\phi(x) = \delta(x - x_0) \quad (7.18)$$

et

$$\rho(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \delta(x - x_0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) dx = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \exp(-ipx_0/\hbar). \quad (7.19)$$

Il est à présent aisé de déterminer la forme explicite de l'équation de Schrödinger dans l'espace des impulsions. Partant de (7.3), nous avons

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial t} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) \right] dx. \end{aligned} \quad (7.20)$$

En intégrant par parties et en utilisant (7.2), on obtient

$$i\hbar \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \chi(p, t) + \frac{1}{2\pi\hbar} \int \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) V(x) \exp\left(\frac{ip'x}{\hbar}\right) \cdot \phi(p', t) dp' dx. \quad (7.21)$$

Si $V(x)$ est une fonction analytique de x , nous pouvons écrire

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}px\right) V(x) = V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}px\right\} \quad (7.22)$$

et par conséquent

$$i\hbar \frac{\partial \chi(p, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \chi(p, t) + V\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}\right) \chi(p, t) \quad (7.23)$$

qui est l'équation de Schrödinger dans l'espace des impulsions. L'analogue de l'équation (7.1) peut s'obtenir directement à partir de l'éq. (7.23) (Le calcul n'est pas trivial !).

Des considérations qui précèdent, il résulte que la mécanique quantique dans l'espace des configurations et la mécanique quantique dans l'espace des impulsions sont deux formulations équivalentes de la même physique !

Dans le cours de 1ère licence on montrera que ces deux descriptions sont des représentations particulières d'une formulation générale et abstraite de la mécanique quantique. Dans cette formulation générale, les notions importantes sont celles de vecteur d'état $|\Psi\rangle_t$ et d'opérateurs (hermitiens) "représentant" des observables (par exemple \hat{x} et \hat{p}). $\Psi(x, t) = \langle x | \Psi \rangle_t$ est alors, pour x fixé une composante particulière du vecteur d'état $|\Psi\rangle_t$ dans une base précise de l'espace de Hilbert à savoir celle qui "diagonalise" l'opérateur position. De même $\chi(p, t) = \langle p | \Psi \rangle_t$, pour p fixé est également une composante particulière du *même vecteur d'état* $|\Psi\rangle_t$, mais dans une autre base, à savoir celle qui "diagonalise" l'opérateur \hat{p} .

Chapitre VIII

Esquisse d'une théorie de la mesure en mécanique quantique

Nous en avons terminé avec les principes de base de la mécanique quantique à une dimension. Avant de généraliser ces principes au cas plus réaliste d'un espace de configuration à 3 dimensions, il n'est peut être pas inutile de revenir sur le "rôle de l'observation" en mécanique quantique, c'est-à-dire sur la notion même de *mesure*.

Dans le contexte de l'équation de Schrödinger, nous avons vu (chapitre V) que pour résoudre cette équation, il fallait se *donner* l'amplitude de probabilité $\Psi(x, t_0 = 0)$ à un instant initial donné t_0 (que nous prenons ici égal à 0). Dans le jargon usuel de la mécanique quantique on dira que le "système" a été *préparé* dans un état donné " $|\Psi\rangle_0$ " dont l'amplitude de probabilité au point x , est $\Psi(x, 0)$. Expérimentalement, cette "préparation" d'un système quantique peut prendre des formes extrêmement variées : les "positions" ou "impulsions" peuvent être plus ou moins bien déterminées (passage d'un faisceau de particules dans un collimateur, accélération d'un faisceau de particules etc ...). Dans le cas d'atomes, nous avons illustré au chapitre VI une "préparation" dans un état d'énergie déterminée (état excité). Théoriquement, la "préparation du système" est rigoureusement définie : " $|\Psi\rangle_0$ ", l'état du système à $t_0 = 0$ est un vecteur *fixé*, unique (à une phase près), de l'espace de Hilbert.

Une fois la "préparation" du système achevée, l'équation de Schrödinger définit *univoquement* l'évolution de ce système ... jusqu'à la "mesure" au temps $t(t > 0)$ d'une propriété de ce système !

L'équation de Schrödinger en elle-même ne décrit *en aucune manière* la "mesure" qui est effectuée sur le système quantique. Par contre, le *résultat* de la mesure est encodé de manière précise dans l'amplitude de probabilité. Ainsi, dans le cas d'une mesure idéale, l'amplitude de probabilité (immédiatement après la mesure) est donnée par le vecteur propre correspondant

à la valeur propre (pour simplifier la discussion, nous supposons qu'il et elle sont uniques) de l'opérateur représentant l'observable qui a été mesurée. La valeur propre dont il est question est le résultat précis de la mesure qui a été effectuée. L'effet d'une mesure sur un système quantique est donc résumé par un *ajustement de l'amplitude* de probabilité.

Dans la formulation des principes de la mécanique quantique donnée dans le chapitre II et qui est due à Feynman, on privilégie la ou les mesures de "position" du système : la "préparation" de ce système est exprimée par l'assertion que la particule quantique se trouve au point x_0 à l'instant $t_0 = 0$. Moyennant cette préparation l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point x à l'instant $t (t > 0)$ est $A(x, t; x_0, 0)$.

Dans le chapitre V, nous avons explicité le lien précis entre l'amplitude de Feynman $A(x, t; x_0, 0)$ et l'amplitude de Schrödinger $\Psi(x, t)$. En ce qui concerne l'évolution d'un système quantique entre deux mesures, ces deux approches sont rigoureusement équivalentes puisque

$$\Psi(x, t) = \int dx_0 A(x, t; x_0, 0) \Psi(x_0, 0) \quad (8.1)$$

et si la particule est effectivement au point, disons $x_0 = 0$ à l'instant $t_0 = 0$, $\Psi(x_0, 0) = \delta(x_0)$ et dans ces conditions l'équation (8.1) devient $\Psi(x, t) = A(x, t; 0, 0)$ comme il se doit.

L'amplitude de Feynman *privilégie l'espace de configuration* dans la description des phénomènes quantiques et elle encode, par définition, l'ajustement de l'amplitude de probabilité résultant d'une mesure de la position. Répétons-le une fois encore : si la particule quantique a été "préparée" pour être au point x_0 à l'instant t_0 , l'amplitude de probabilité (de Feynman) de la trouver en un point quelconque x à un instant quelconque $t (t > t_0)$ est $A(x, t; x_0, t_0)$ pourvu qu'entre l'instant initial t_0 et l'instant t le système n'ait pas été perturbé. Dans ces conditions, si à l'instant t la particule est mesurée au point x_1 l'amplitude de Feynman est évidemment $A(x_1, t; x_0, t_0)$ tandis que si la particule est mesurée au point x_2 l'amplitude est $A(x_2, t; x_0, t_0)$! Si la particule quantique est au point x_1 à l'instant t elle n'est évidemment pas au point x_2 et vice-versa ! L'ajustement de l'amplitude de Feynman suivant le résultat d'une mesure de la position va de soi et est inclus dans la définition même de cette amplitude.

Notons encore que l'amplitude de Feynman permet également de comprendre (intuitivement) l'effet "dramatique" d'une mesure de la position d'une particule quantique : une mesure rend *toujours exclusives* des alternatives qui, en l'absence de mesure, seraient interférentes.

Ceci dit dans le contexte de la mécanique quantique non relativiste, l'ajustement de l'amplitude de probabilité qui résulte d'une mesure s'exprime tout aussi bien au moyen de

l'amplitude de Schrödinger. Cette dernière est même plus “souple” que l'amplitude de Feynman dans le sens qu'elle est “ajustable” suite à la mesure de *n'importe quelle observable* du système quantique et pas seulement la position (on peut évidemment discuter de ce qui est réellement gagné par cette souplesse : in fine, toute mesure n'est-elle pas une mesure de position ?).

Résumons-nous : en ce qui concerne l'*effet* ou le *résultat* d'une mesure de la position d'un système quantique, l'amplitude de Feynman ou l'amplitude de Schrödinger sont bien entendu rigoureusement équivalentes. L'amplitude de Schrödinger permet en outre de formuler simplement l'effet ou le résultat de la mesure de n'importe quelle variable dynamique ! Le résultat de la mesure est toujours (idéalement) *une valeur propre* (supposée non dégénérée) de l'opérateur représentant la variable dynamique et l'effet de la mesure est *d'ajuster l'amplitude de probabilité* de manière à ce qu'elle représente l'*état propre* correspondant à la valeur propre mesurée.

[A vrai dire le formalisme fonctionnel de Feynman mène aux mêmes conclusions, mais une discussion sérieuse nous entraînerait trop loin].

Toutefois il y a une *différence conceptuelle capitale* entre le “formalisme opératoire” (Schrödinger) et le formalisme fonctionnel (Feynman) et elle concerne le *processus de mesure lui-même* ! Ce processus est inévitablement *extérieur* au contexte de l'équation de Schrödinger : en général un “appareil de mesure” est un système macroscopique dont l'évolution n'est pas décrite par une équation de Schrödinger !! Par contre, dans le formalisme fonctionnel il n'y a aucune difficulté à intégrer le processus de mesure dans la théorie. Explicitons brièvement ce point : on part d'une situation où on a un “système” (qu'on va appeler l'appareil de mesure M) dont l'*action* $S_M \gg \hbar$ et un “système quantique” dont l'*action* est S_q . Il n'y a manifestement aucune difficulté à “modéliser” le processus de mesure en ajoutant à l'action un terme correspondant à l'interaction entre “l'appareil de mesure M ” et le système quantique “ q ”

$$S_{Tot} = S_M + S_q + S_{Mq}.$$

Comme $S_M \gg \hbar$, l'amplitude de probabilité correspondant à l'appareil de mesure va être *nulle* sauf pour la “trajectoire classique” de cet appareil (Le “monde classique” est une *conséquence* des principes de la mécanique quantique et ne doit pas être postulé indépendamment !). Bien entendu, le terme d'interaction S_{Mq} va “perturber” cette évolution classique (par exemple, une “aiguille” d'un compteur va bouger).

Pour le système quantique le terme S_{Mq} est éventuellement le terme qui sera “responsable”

de l'ajustement de l'amplitude de probabilité. De plus, ce terme encode bien ce qui est l'essence même du “processus de mesure d'une propriété d'un système quantique” à savoir l'établissement d'une *correlation* entre une variable “quantique” et une variable “de l'appareil de mesure”.

Il y aurait bien entendu beaucoup de choses à préciser dans cette “description du processus de mesure”. Mais le point essentiel est celui que nous venons d'énoncer : le processus de mesure, processus “physique” par excellence fait partie intégrante de la théorie quantique à la Feynman. Restons-en là.

Chapitre IX

L'expérience de Stern-Gerlach et la quantification du moment angulaire

En principe, il n'y a aucune difficulté conceptuelle à généraliser la formulation de la mécanique quantique donnée dans les chapitres précédents au cas d'un espace de configuration réaliste à savoir de dimension trois. La seule grandeur réellement nouvelle qui apparaît dans cette généralisation est le *moment angulaire*.

Classiquement, le *moment orbital*, $\vec{L}_{\text{clas}} = \vec{x}_{\text{clas}} \wedge \vec{p}_{\text{clas}}$, d'un système soumis à des forces centrales ($V(\vec{x}) = V(r)$ avec $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$) est une des caractéristiques essentielles du mouvement du système. Ainsi la trajectoire d'une planète autour du soleil est en fait complètement déterminée par l'énergie et le moment angulaire de ce système à deux corps.

Quantiquement, le moment orbital ou, plus généralement, le moment angulaire joue un rôle peut-être plus fondamental encore ! Prenons par exemple un électron au voisinage d'un noyau atomique (par analogie avec la situation classique, on utilise souvent l'expression "un électron qui tourne autour d'un noyau", mais malgré le mérite intuitif de cette expression, il faut rester conscient du fait que ce n'est qu'une analogie : la notion de trajectoire n'est pas une propriété intrinsèque d'un électron). Cet électron a un moment orbital $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{x}} \wedge \hat{\vec{p}}$ qui, en première approximation, est une constante du mouvement : la signification précise de cette assertion est que pour des forces centrales, l'hamiltonien \hat{H} commute avec $\hat{\vec{L}}$. Remarquer que les composantes de $\hat{\vec{L}} \equiv (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ ne commutent pas entre elles. Nous reviendrons sur ce fait dans la suite de ce chapitre. Outre son moment orbital, l'électron possède un moment angulaire intrinsèque, \vec{S} , appelé le *spin*. Dans le contexte d'un "modèle planétaire de l'atome" (atome de Bohr) le spin est quelquefois présenté en analogie avec le mouvement de rotation d'une planète sur elle-même. Cette analogie est fondamentalement incorrecte : le spin d'un électron (ou d'un photon, neutron, quark ...) est une propriété intrinsèquement quantique qui n'a pas d'analogue classique. Strictement parlant, la notion de spin est une

notion de mécanique quantique *relativiste*, mais nous n'avons pas encore le bagage technique pour expliquer et justifier cette assertion.

Quoi qu'il en soit, une propriété fondamentale du moment angulaire (orbital ou de spin), en mécanique quantique, c'est d'être toujours discrétisé ("quantifié"). Cette discrétisation du moment angulaire doit être mise en parallèle avec la discrétisation de l'énergie pour un système confiné (état lié) : ce sont des prédictions spectaculaires de la physique quantique abondamment confirmées par l'expérience.

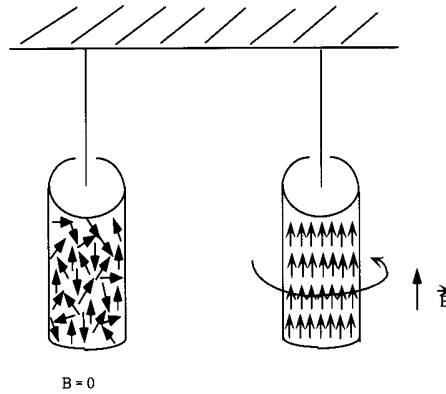
Dans ce chapitre nous décrivons qualitativement les faits expérimentaux qui mettent en évidence cette discrétisation du moment angulaire (l'expérience de Stern-Gerlach); la mathématique du moment angulaire quantique sera développée dans le chapitre suivant.

I Propriétés magnétiques de la matière

Le moment angulaire d'un système atomique est intimement lié aux *propriétés magnétiques* de la matière. Intuitivement ce fait n'est guère surprenant puisque protons et électrons sont des particules chargées : les courants électriques engendrés par le mouvement de ces charges vont, en vertu des équations de Maxwell, induire des effets magnétiques.

Le lien précis entre moment angulaire et propriétés magnétiques est remarquablement illustré par l'effet gyromagnétique (encore appelé effet Einstein-de Haas) : lorsqu'une barre de fer initialement non magnétisée est brusquement plongée dans un champ magnétique parallèle à son axe, elle tend à tourner autour de cet axe. (L'effet est extrêmement faible mais mesuré à très haute précision).

Intuitivement cet effet gyromagnétique peut être décrit comme suit : dans une barre de fer non magnétisée on peut considérer les électrons comme de petits aimants orientés dans toutes les directions; en présence d'un champ magnétique, ces petits aimants vont s'orienter dans la direction du champ, mais ce faisant, leurs moments angulaires (en fait leurs spins) vont également s'orienter dans la direction du champ extérieur. Mais le moment angulaire total de la barre de fer est initialement nul et il reste conservé en présence du champ magnétique. Dès lors pour compenser l'alignement des spins des électrons, la barre de fer doit développer un moment angulaire *orbital*. (Ce qu'on mesure en fait c'est la torsion du fil de suspension) voir figure ci-dessous



Cet effet gyromagnétique est important à plus d'un titre. En particulier, il démontre l'équivalence, dans le bilan du moment angulaire, des "effets du spin" et du moment angulaire orbital. L'effet gyromagnétique est un effet macroscopique dû aux spins des électrons, mais comme c'est un effet collectif il ne dit rien sur la discrétisation ou non du moment angulaire.

En fait l'effet de la discrétisation du moment angulaire est souvent indirectement révélé dans la "structure fine" des spectres atomiques c'est-à-dire dans les déplacements des niveaux d'énergie d'un atome soumis à un champ magnétique (effet Zeeman). Ces déplacements des niveaux d'énergie sont généralement très petits (de l'ordre du centième d'eV) mais les valeurs précises de ces déplacements ont joué un rôle important dans la détermination du nombre d'états quantiques accessibles à un système atomique. Ce sont ces déplacements qui ont amenés Uhlenbeck et Goudsmit à introduire, en 1925, la notion même de spin.

Mais revenons à la discrétisation du moment angulaire et à l'expérience historique de Stern-Gerlach (1922).

II L'expérience de Stern-Gerlach

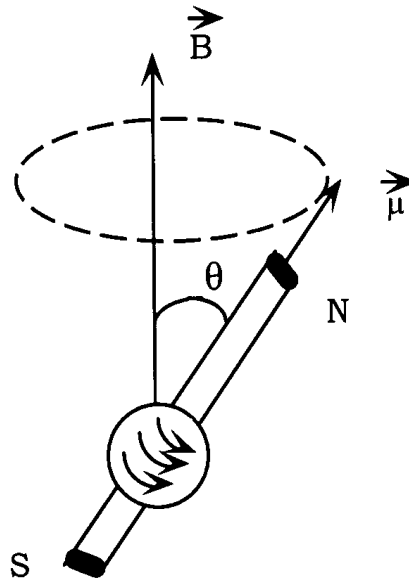
Cette expérience a été conçue dans le but spécifique de tester la discrétisation du moment angulaire d'atomes individuels (électriquement neutres) en présence d'un champ magnétique. L'idée directrice est d'envoyer un faisceau d'atomes (historiquement des atomes d'argent) à travers une région dans laquelle s'exerce un champ magnétique *non uniforme* mais *perpendiculaire* au faisceau incident. Le rôle de ce champ magnétique est d'exercer des forces qui vont défléchir le faisceau et cette déflexion est mesurée dans un détecteur situé en dehors de la région où agit le champ magnétique.

Avant de décrire le dispositif expérimental nous esquissons brièvement les aspects théoriques sous-jacents à cette expérience historique.

1. Force sur un dipôle magnétique et déflexion d'un faisceau atomique

Pour simplifier au maximum la discussion qui suit, nous imaginons un atome comme un petit aimant dont le moment dipolaire est $\vec{\mu}$ et nous allons même visualiser ce dipôle comme un composé de charges magnétiques (pôles) $\pm q_m$ séparées d'une distance ℓ de sorte que $|\vec{\mu}| = q_m \ell$. Naïvement le moment magnétique est un vecteur dont la direction est celle du moment angulaire de l'atome et dont le sens dépend du signe de la charge dont le mouvement est responsable de la création de ce dipôle (voir paragraphe 3).

Classiquement, si un petit aimant est placé dans un champ magnétique \vec{B} , il y a précession du moment magnétique.



l'angle θ entre $\vec{\mu}$ et \vec{B} reste constant au cours de cette précession. Le champ magnétique \vec{B} exerce une force sur les pôles nord et sud du dipôle et le “moment de force” ($\vec{\mu} \wedge \vec{B}$) est évidemment perpendiculaire au moment angulaire du système qui est aligné avec $\vec{\mu}$. Bref si nous choisissons la direction du champ \vec{B} comme direction Oz , la composante z du moment magnétique

$$\mu_z = \mu \cos \theta = q_m \ell \cos \theta \quad (9.1)$$

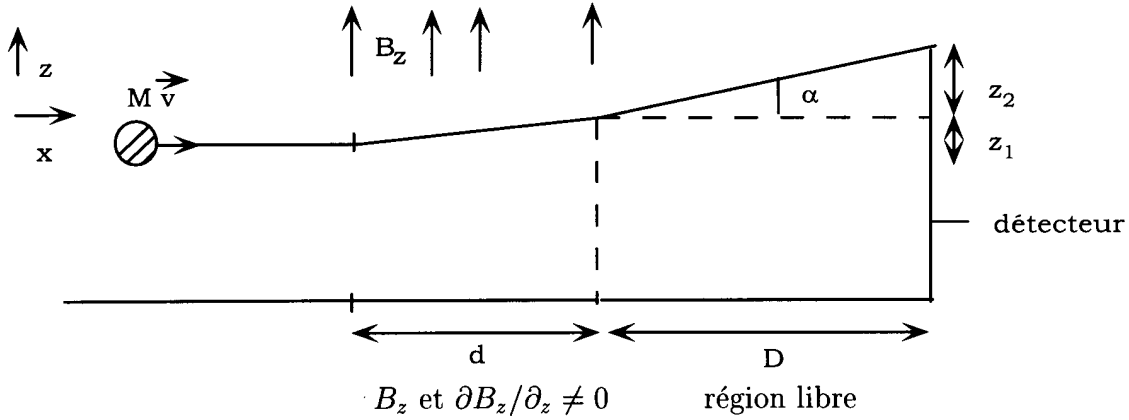
reste constante durant la précession (répétons que tout ceci est classique).

Si le champ \vec{B} est uniforme, notre petit aimant va précesser mais ne sera soumis à aucune force nette : la force $q_m \vec{B}$ qui s'exerce sur un des pôles est compensée par la force $-q_m \vec{B}$ qui s'exerce sur l'autre pôle. Mais que va-t-il se passer en présence d'un champ non uniforme (toujours supposé dans la direction z) ? Le gradient $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ va se traduire par une force dans la direction z . En effet un dipôle de longueur ℓ et orienté à un angle θ avec l'axe des z a ses

pôles séparés par une distance $\ell \cos \theta$ le long de l'axe z et dès lors, la force F_z qui s'exerce sur ce dipôle est donnée par

$$F_z = q_m B_z - q_m \left(B_z + \ell \cos \theta \frac{\partial B_z}{\partial z} \right) = -q_m \ell \cos \theta \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (9.2)$$

Supposons à présent qu'un atome de moment magnétique $\vec{\mu}$ traverse à une vitesse v (dans la directions Ox) une région de longueur d où agit un champ magnétique non uniforme (dans la direction Oz) et qu'ensuite cet atome se propage librement dans une région de longueur D avant d'atteindre un détecteur. Schématiquement, nous avons



Le temps de passage de l'atome dans la région où B_z et $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ sont non nuls est $t = \frac{d}{v}$ et durant ce temps l'atome est uniformément accéléré. Cette accélération constante (dans la direction Oz) est donnée par $\frac{F_z}{M}$ où F_z est l'éq. (9.2) et M la masse de l'atome. Dès lors le déplacement transverse (la déflexion) de cet atome est obtenu par la formule

$$z_1 = \frac{1}{2} a t^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{F_z}{M} \right) \left(\frac{d}{v} \right)^2 = \frac{d^2}{2Mv^2} \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (9.3)$$

tandis que l'impulsion transverse, p_z , acquise par l'atome est

$$p_z = F_z t = \frac{d}{v} \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (9.4)$$

Dès lors l'angle de déflexion α est défini par

$$\tan \alpha = \frac{p_z}{Mv} = \frac{d}{Mv^2} \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (9.5)$$

Lorsque l'atome a quitté la région où B_z et $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ sont non nuls, il continue à se propager librement. Si D est la distance ainsi parcourue avant d'atteindre un détecteur, la déflexion additionnelle est donnée par

$$z_2 = D \tan \alpha = \frac{dD}{Mv^2} \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (9.6)$$

et, par conséquent, la distance de déflexion totale $z = z_1 + z_2$ s'écrit

$$z = \frac{d}{Mv^2} \left(D + \frac{d}{2} \right) \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}. \quad (9.7)$$

Le point essentiel de ce calcul (qui est, répétons-le, un calcul *classique*) est que si le moment magnétique $\vec{\mu}$ de l'atome, et donc le moment angulaire de celui-ci, peut pointer dans n'importe quelle direction la composante z de $\vec{\mu}$ prend un *ensemble continu de valeurs* et, en vertu de l'équation (9.7), la déflexion totale z d'un échantillon suffisamment important d'atomes prendra également une série de valeurs continûment distribuées.

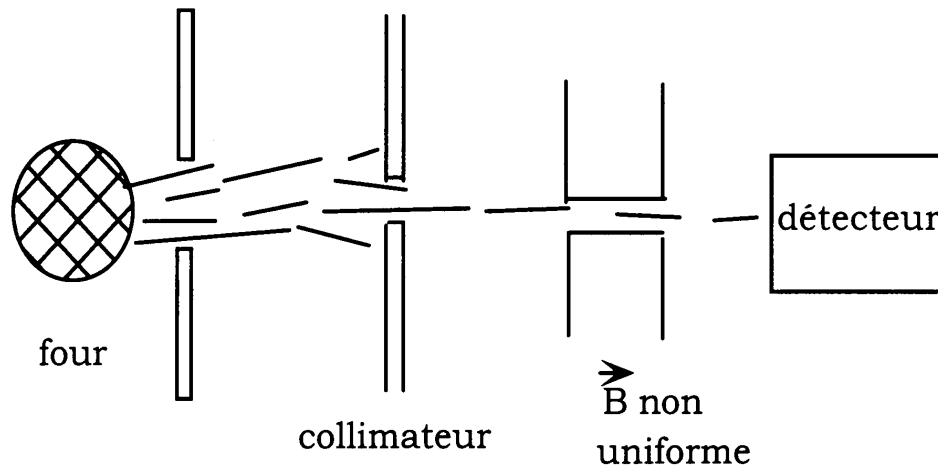
Par contre si, pour quelque raison que ce soit, les valeurs de μ_z sont limitées à un ensemble discret, il en sera de même pour la déflexion z . Le résultat de l'expérience que nous allons à présent décrire est de montrer sans la moindre équivoque que les valeurs de μ_z (et donc de la “composante z ” du moment angulaire) sont effectivement discrètes (ou quantifiées) ! Répétons une dernière fois qu'un tel résultat est classiquement incompréhensible.

Le côté simpliste de la discussion qui précède n'enlève rien à l'aspect spectaculaire du résultat de l'expérience de Stern-Gerlach. De ce résultat il découle qu'en physique quantique il n'est plus permis de parler d'un vecteur moment angulaire qui pointe dans une direction donnée et, plus fondamentalement que la “composante z ” du moment angulaire (et donc μ_z) ne prend effectivement que des valeurs *discrètes*.

2. L'expérience de Stern-Gerlach (variante)

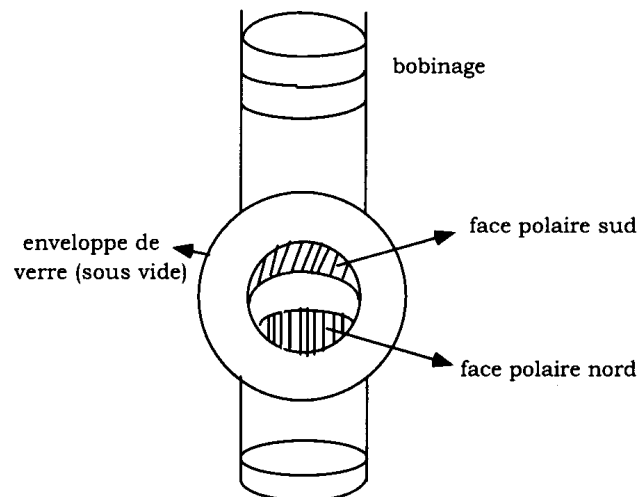
Tout d'abord une remarque préliminaire : pourquoi faire cette expérience avec un faisceau d'atomes neutres ? Vu les difficultés “techniques” de produire, suivre et détecter un faisceau de particules neutres, ne serait-il pas plus simple d'utiliser des ions ? La réponse est que pour des ions les forces électriques et magnétiques agissant sur des particules chargées sont considérablement plus importantes que les forces agissant sur des moments magnétiques et dues à des gradients du champ magnétique : la déflexion due à la discrétisation du moment angulaire serait complètement noyée par la *déflexion continue* due à la charge électrique.

Ceci dit venons-en au schéma expérimental de Stern-Gerlach ou plutôt d'une variante de cette expérience (atomes de césium plutôt qu'atomes d'argent).



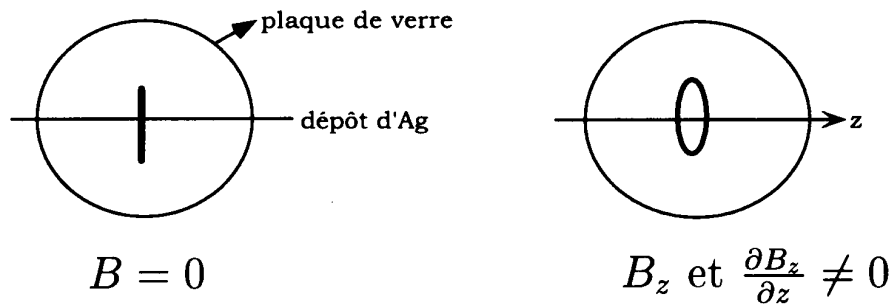
Les atomes de césium émergent d'un four (ils sont vaporisés par échauffement d'un échantillon de césium métallique). Une fraction des atomes de césium entre dans la région de champ magnétique non uniforme après passage par une fente mince. La région où B_z et $\frac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0$ a environ 10 cm de longueur. Les atomes se propagent ensuite librement sur une distance d'environ 50 cm jusqu'à un détecteur. Dans l'expérience originelle de Stern-Gerlach, les atomes d'argent étaient détectés par accumulation sur une plaque de verre (dépôt visible). Avec les atomes de césium la technique de détection est plus sophistiquée et les détails ne nous concernent pas ici. En gros on mesure de manière précise la distribution électrique des atomes de césium (ionisés par contact avec un fil de niobium porté à incandescence) en fonction de l'angle de déflexion du faisceau initial.

Le champ magnétique inhomogène est produit par un électro-aimant dont les faces polaires ont une découpe cylindrique comme indiqué ci-dessous.



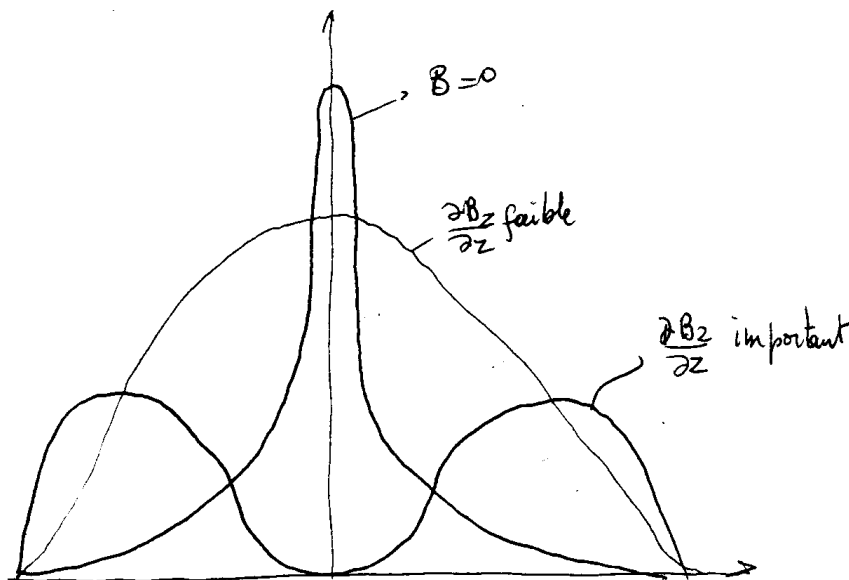
Cette géométrie cylindrique des faces polaires fournit un champ magnétique dont le gradient $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ est pratiquement constant dans l'intervalle (quelques millimètres) séparant les pôles.

Les résultats de l'expérience de Stern-Gerlach proprement dite (atomes d'argent) sont esquissés ci-dessous



Dans la région centrale où le gradient $\frac{\partial B_z}{\partial z}$ est le plus intense on voit nettement la séparation du faisceau en 2 composantes.

Dans la variante de l'expérience de Stern-Gerlach décrite ci-dessus les résultats sont les suivants :



Profils de faisceaux d'atomes de Césium

En l'absence de champ magnétique, le faisceau (bien collimaté) produit un pic étroit de courant détecté. Dans un faible gradient de champ magnétique le faisceau s'élargit symétriquement autour de $z = 0$ mais sans indication de "quantification". Lorsque $\frac{\partial B_z}{\partial z}$

est suffisamment important on voit à nouveau la séparation du faisceau en 2 composantes correspondant à des déflexions égales (et opposées) dans la direction z . L'élargissement des pics de courant est dû au large spectre de vitesse des atomes du faisceau.

Le résultat essentiel de ces expériences est de démontrer la discrétisation de la composante z du moment angulaire (ou de μ_z). Depuis l'expérience a été répétée avec divers faisceaux atomiques et, suivant le cas, ces faisceaux ne se séparent pas ou se séparent en deux, trois, quatre ou davantage de faisceaux distincts. La quantification du moment angulaire est un fait expérimental incontournable !

Remarque Dans le cas des atomes d'Ag ou de Cs ce qui est, en fait, quantifié c'est la composante z du *spin* de l'électron.

III Ordres de grandeur

Les données expérimentales de l'expérience de Stern-Gerlach avec des atomes de césium sont les suivantes :

$2z$: séparation des pics de courant = .37 cm

kT : énergie cinétique des atomes émergeant du four $\simeq 310^{-2} eV$

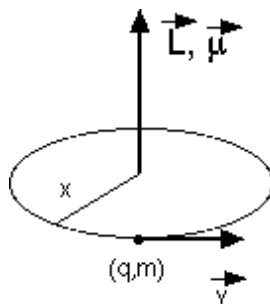
$\frac{\partial B_z}{\partial z} \approx 10^4$ gauss/cm

$d \approx 12.5$ cm

$D \simeq 50$ cm

En utilisant l'éq. (9.7), ces données impliquent $\mu_z = \pm 9.10^{-21}$ erg/Gauss.

Théoriquement, dans l'image semi classique que nous avons donnée du phénomène on considère une charge électrique q qui parcourt à la vitesse v une orbite circulaire de rayon r .



(Cette image est évidemment incorrecte dans le contexte de la mécanique quantique, mais elle donnera le "bon ordre" de grandeur !).

Ce mouvement périodique ($T = \frac{2\pi r}{v}$) de la charge q est équivalent à un courant électrique I donné par

$$I = \frac{q}{T} = \frac{qv}{2\pi r} \quad (9.8)$$

Ce courant “entoure” une région dont la surface est πr^2 et en vertu des lois de l'électromagnétisme classique nous avons un dipôle magnétique $\vec{\mu}$ avec

$$|\vec{\mu}| = \frac{I(\pi r^2)}{c} = \frac{qrv}{2c} \quad (cgs). \quad (9.9)$$

D'autre part le moment angulaire *orbital* de cette particule de charge q et de masse m est donné par

$$L = mvr \quad (9.10)$$

et par conséquent

$$|\mu| = \frac{qL}{2mc}. \quad (9.11)$$

De cette formule classique nous pouvons tirer une unité naturelle pour le moment magnétique d'un atome : nous verrons explicitement que L est en fait un multiple (entier) de \hbar ; dès lors

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} \quad (cgs) \quad (9.12)$$

le magnéton de Bohr est défini par la charge e et la masse m_e de l'électron et les constantes universelles \hbar et c . Numériquement

$$\mu_B = 9.27 \cdot 10^{-21} \text{ erg/gauss} \quad (cgs).$$

Il est conventionnel dans le contexte des propriétés magnétiques des atomes de définir

$$\mu = g \mu_B. \quad (9.13)$$

Ce facteur g est quelquefois appelé le facteur de Landé.

L'analyse qui précède (semi-classique et essentiellement incorrecte) ne tient compte que du *moment angulaire orbital* des électrons. A la vérité, un grand nombre de résultats expérimentaux et en particulier les résultats de l'expérience de Stern-Gerlach (atomes d'argent ou de césium) ne sont explicables qu'en faisant appel au “moment angulaire intrinsèque” c'est-à-dire au *spin* de l'électron. Le “moment angulaire de spin” de l'électron dans une direction donnée (S_z) a comme valeurs propres $\pm \frac{\hbar}{2}$ tandis que le moment angulaire orbital (L_z) a comme valeurs propres des multiples entiers de \hbar (plus de précisions à ce sujet dans le chapitre X). Néanmoins le moment magnétique associé au spin est, à une très bonne approximation, un magnéton de Bohr. Une manière d'exprimer cet état des choses est de dire que le *facteur g* (éq. (9.13)) pour le moment magnétique de *spin* est 2.

Dans ce contexte le facteur g est quelquefois appelé “rapport gyromagnétique”.

Ce “double magnétisme” dû au spin de l’électron n’a pas d’explication classique et, strictement parlant, n’a pas d’explication non plus dans le contexte de la mécanique quantique non relativiste ! *Le spin est une notion intrinsèquement relativiste (et quantique).* Cette notion peut très bien être incorporée phénoménologiquement dans le contexte de la mécanique quantique non relativiste mais le prix à payer est que le facteur $g(\approx 2)$ est alors un paramètre dont la valeur n’a pas d’explication théorique. Nous avons mentionné dans le chapitre V que le $(g - 2)$ de l’électron était une des propriétés de l’électron les mieux mesurées et les mieux calculées dans le contexte de l’électrodynamique quantique (QED) qui est la théorie *quantique et relativiste* de l’interaction électromagnétique !

Pour terminer ces considérations générales sur les propriétés magnétiques des atomes signalons que les *noyaux* nucléaires et en particulier le neutron et le proton ont également des moments magnétiques. Le magneton nucléaire est défini par analogie avec l’éq. (9.12)

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} \quad (9.14)$$

où e et m_p sont la charge et la masse du *proton*. Un magneton nucléaire est donc environ 1880 fois plus petit qu’un magneton de Bohr. Les propriétés magnétiques de la matière sont dominées par le “magnétisme électronique” !

Mais il est temps de passer à une *description correcte* (dans le contexte de la mécanique quantique non relativiste) du moment angulaire. Par manque de temps nous allons nous restreindre au *moment angulaire orbital*.

Chapitre X

Le moment angulaire orbital

Dans ce chapitre nous commençons par étudier le moment angulaire orbital dans un exemple simple, à savoir le mouvement dans un plan. Nous définissons l'opérateur de moment angulaire orbital \hat{L} correspondant à ce cas d'un mouvement planaire et nous étudions son spectre. Comme application de cet exercice préliminaire, nous revenons à l'oscillateur harmonique à deux dimensions et montrons que $\hat{H}_{O.H.}$ et \hat{L} forme un "système" complet d'observables qui commutent. Après quelques généralités sur la mécanique quantique à trois dimensions nous entrons finalement dans le vif du sujet de ce chapitre, à savoir les propriétés des opérateurs de moment angulaire orbital $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$.

I Exercice préliminaire : la mécanique quantique à deux dimensions

1. Généralités

Nous partons de l'équation de Schrödinger bidimensionnelle, à savoir

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x, y; t) = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_2 \Psi(x, y; t) + V(x, y) \Psi(x, y; t) \quad (10.1)$$

où Δ_2 , le laplacien à deux dimensions, est donné en coordonnées cartésiennes (x, y) par

$$\Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (10.2)$$

L'amplitude de probabilité $\Psi(x, y; t)$ est à présent une fonction des deux variables de position (x, y) et du temps. La probabilité de trouver la particule quantique dans un élément de surface $dxdy$ autour du point (x, y) est donnée par :

$$P(x, y; t) dxdy = |\Psi(x, y; t)|^2 dxdy. \quad (10.3)$$

En généralisant le plus naturellement du monde les considérations des chapitres III et IV, nous définissons les opérateurs de position et d'impulsion comme suit :

- position : (\hat{x}, \hat{y}) avec

$$\hat{x}\Psi(x, y; t) = x\Psi(x, y; t) \quad (10.4)$$

et

$$\hat{y}\Psi(x, y; t) = y\Psi(x, y; t) \quad (10.5)$$

- impulsion (\hat{p}_x, \hat{p}_y) avec

$$\hat{p}_x\Psi(x, y; t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}(x, y; t) \quad (10.6)$$

et

$$\hat{p}_y\Psi(x, y; t) = -i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial y}(x, y; t) \quad (10.7)$$

et, bien entendu, l'équation de Schrödinger peut s'écrire en terme de l'opérateur hamiltonien \hat{H} :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x, y; t) = \hat{H}\Psi(x, y; t) \quad (10.8)$$

où

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}, \hat{y}). \quad (10.9)$$

Les relations de commutation de ces opérateurs s'obtiennent sans difficultés. Ainsi :

$$[\hat{x}, \hat{y}] = [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{y}, \hat{p}_x] = 0 \quad (10.10)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{x}] = [\hat{p}_y, \hat{y}] = -i\hbar \quad (10.11)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial\hat{V}}{\partial x}(\hat{x}, \hat{y}) \quad (10.12)$$

$$[\hat{p}_y, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial\hat{V}}{\partial y}(\hat{x}, \hat{y}) \quad (10.13)$$

$$[\hat{x}, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\hat{p}_x}{m} \quad (10.14)$$

$$[\hat{y}, \hat{H}] = -i\hbar\frac{\hat{p}_y}{m} \quad (10.15)$$

2. L'opérateur \hat{L}

Une nouvelle observable, le moment angulaire orbital, est naturellement définie par :

$$\hat{L} \stackrel{def}{=} \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \quad (10.16)$$

et c'est cette observable que nous voulons étudier plus en détail.

Montrons tout d'abord que pour *un potentiel central* $V(\hat{x}, \hat{y}) = V(\hat{r})$ où $\hat{r} = (\hat{x}^2 + \hat{y}^2)^{1/2}$, l'observable \hat{L} est une constante du mouvement i.e.

$$[\hat{L}, \hat{H}] = 0. \quad (10.17)$$

La vérification de l'éq. (10.17) est immédiate : tout d'abord

$$[\hat{L}, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2] = 0 \quad (10.18)$$

se vérifie par calcul direct à partir de

$$[\hat{L}, \hat{p}_x] = i\hbar \hat{p}_y \quad [\hat{L}, \hat{p}_y] = -i\hbar \hat{p}_x.$$

De même à partir de

$$[\hat{L}, \hat{x}] = i\hbar \hat{y} \quad \text{et} \quad [\hat{L}, \hat{y}] = -i\hbar \hat{x}$$

on montre aisément que

$$[\hat{L}, \hat{x}^2 + \hat{y}^2] = 0 \quad (10.19)$$

et dès lors \hat{L} commute avec une fonction arbitraire de $\hat{r}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2$. Une alternative à cette dérivation est de calculer directement le commutateur de \hat{L} et de $\hat{V}(\hat{r})$:

$$\begin{aligned} [\hat{L}, \hat{V}(\hat{r})] &= \hat{x}(-i\hbar) \frac{\partial \hat{V}}{\partial \hat{y}} - \hat{y}(-i\hbar) \frac{\partial \hat{V}}{\partial \hat{x}} \\ &= -i\hbar \hat{x} \hat{y} \frac{1}{\hat{r}} \frac{d\hat{V}}{d\hat{r}} - i\hbar \hat{y} \hat{x} \frac{1}{\hat{r}} \frac{d\hat{V}}{d\hat{r}} = 0. \end{aligned}$$

La signification physique de l'équation (10.17) est immédiate : le moment angulaire \hat{L} est une *constante du mouvement* dans un potentiel central.

3. Le spectre de \hat{L}

Pour déterminer le *spectre* de l'opérateur \hat{L} - c'est-à-dire l'ensemble des valeurs propres et des vecteurs propres de \hat{L} - le plus simple est de passer en *coordonnées polaires* (r, φ) où

$$x = r \cos \varphi \quad (10.20)$$

$$y = r \sin \varphi \quad (10.21)$$

et

$$\hat{L} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.22)$$

En effet,

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f(x, y) = -i\hbar \left(\frac{\partial x}{\partial \varphi} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right) - i\hbar \left(\frac{\partial y}{\partial \varphi} \right) \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right) \quad (10.23)$$

mais, par suite de (10.20) et (10.21) $\frac{\partial x}{\partial \varphi} = -y$ et $\frac{\partial y}{\partial \varphi} = x$ et par conséquent $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f(x, y) = (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)f(x, y) = \hat{L}f(x, y)$ ce qui démontre l'équation (10.22).

L'équation aux valeurs propres peut donc s'écrire en coordonnées polaires

$$\hat{L}\Phi(\varphi) = \lambda\Phi(\varphi) \quad (10.24)$$

soit encore

$$-i\hbar \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} = \lambda\Phi(\varphi). \quad (10.25)$$

La solution (unique) de cette équation différentielle est donnée par

$$\Phi(\varphi) = e^{+i\lambda\varphi/\hbar}. \quad (10.26)$$

Mais le point du plan dont les coordonnées polaires sont (r, φ) coïncide avec le point $(r, \varphi + 2\pi)$. Nous imposons donc la condition physique que $\Phi(\varphi)$ soit monovaluée dans le plan, c'est-à-dire

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi). \quad (10.27)$$

Il en résulte que $\frac{2\pi\lambda}{\hbar}$ doit être un multiple m (*entier*) de 2π soit

$$\lambda = m\hbar \quad (10.28)$$

où $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$

Ce résultat est fondamental : le moment angulaire \hat{L} est toujours “quantifié” c'est-à-dire que le spectre de l'opérateur \hat{L} est *toujours* discret bien que \hat{L} soit construit à partir d'opérateurs $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{p}_x, \hat{p}_y)$ qui eux peuvent avoir un spectre continu.

En résumé, les valeurs propres de \hat{L} sont données par l'éq. (10.28) et les fonctions propres correspondantes sont $e^{im\varphi}$. Remarquons que ces fonctions propres peuvent encore s'écrire sous la forme

$$\frac{(x + iy)^m}{r^m}. \quad (10.29)$$

4. L'oscillateur harmonique à deux dimensions

Dans le chapitre IV, nous avons complètement résolu le problème de l'oscillateur harmonique à deux dimensions (par séparation des variables). Rappelons (eq.(4.124)) que le spectre de l'hamiltonien est donné par

$$E_{n,m} = \hbar\omega(n + m + 1) \quad (10.30)$$

et les amplitudes de probabilité correspondant aux premiers niveaux d'énergie sont données dans le tableau ci-dessous

$\left(\alpha = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}\right)$			
$N = n + m$	n	m	Etats propres (non normalisés)
0	0	0	$e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2)}$
1	1	0	$2\alpha x e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2)}$
	0	1	$2\alpha y e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2)}$
2	2	0	$(4\alpha^2 x^2 - 2)e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2)}$
	1	1	$4\alpha^2 x y e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2)}$
	0	2	$(4\alpha^2 y^2 - 2)e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+y^2)}$
	

Comme $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$, les opérateurs \hat{H} et \hat{L} sont simultanément diagonalisables. Par conséquent nous pouvons (par combinaison linéaire des états propres d'une énergie donnée) construire des états propres simultanés de \hat{H} et de \hat{L} . Le résultat est le suivant :

N	m	Etats propres (non normalisés)
0	0	$e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$
1	+1	$e^{i\varphi} r e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$
	-1	$e^{-i\varphi} r e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$
2	2	$e^{2i\varphi} r^2 e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$
	0	$(\alpha^2 r^2 - 1)e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$
	-2	$e^{-2i\varphi} r^2 e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}}$

et ainsi de suite. Pour une valeur donnée de N on peut montrer que les valeurs de m sont

$$m = N, N - 2, N - 4 \dots - (N - 4), -(N - 2), -N \quad (10.31)$$

Notez que le m de l'éq. (10.30) n'est pas le même m que dans l'éq. (10.31).

L'intérêt de ce petit exercice est de montrer que $\{\hat{H}, \hat{L}\}$, l'ensemble des opérateurs \hat{H} et \hat{L} , est un *système complet d'observables qui commutent* : pour la paire de valeurs propres $E_N = (N + 1)\hbar\omega$ (de \hat{H}) et $\hbar m$ (de \hat{L}) avec les valeurs de m restreintes par l'éq. (10.31) il y a un et un seul vecteur propre simultané de \hat{H} et \hat{L} .

Exercices

- 1) Ecrivez explicitement l'équation de Schrödinger en coordonnées polaires.
- 2) Vérifiez que les amplitudes de probabilité données dans le second tableau ci-dessus sont bien des solutions de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.
- 3) Vérifiez l'orthogonalité des états propres simultanés de \hat{H} et \hat{L} .

II Éléments de mécanique quantique à trois dimensions

Nous arrivons, enfin, à la formulation de la mécanique quantique dans un espace de configuration à trois dimensions. Pour ne pas alourdir l'exposé nous prenons l'équation de Schrödinger comme point de départ et nous nous contentons d'esquisser la généralisation des concepts et méthodes décrits dans les chapitres III à VII pour le cas unidimensionnel. Rappelons quand même que le véritable point de départ conceptuel de la mécanique quantique à une, deux ou trois dimensions reste l'*intégrale de chemin* (voir Chap. II).

1. Equation de Schrödinger et conservation de la probabilité

Pour un système quantique *non relativiste*, l'amplitude de probabilité encore appelée fonctions d'ondes est une fonction $\Psi(\vec{x}; t)$ des coordonnées $\vec{x} \equiv (x, y, z)$ et du temps t .

Cette amplitude contient toute l'information sur le système quantique.

En présence d'un potentiel $V(\vec{x})$, l'évolution de l'amplitude $\Psi(\vec{x}, t)$ est dictée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{x}, t) + V(\vec{x}) \Psi(\vec{x}, t) \quad (10.32)$$

où Δ , le laplacien, est donné en coordonnées cartésiennes par $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

La probabilité de trouver, au temps t , le système quantique dans un élément de volume $dV = dx dy dz$ autour du point \vec{x} est donnée par

$$\rho(\vec{x}, t) dV = |\Psi(\vec{x}, t)|^2 dV \quad (10.33)$$

Cette définition implique la condition de normalisation

$$\int_D |\Psi(\vec{x}, t)|^2 dV = 1 \quad (10.34)$$

où le domaine d'intégration D est, en général, l'espace \mathbb{R}^3 tout entier.

La conservation de la probabilité découle de l'éq. (10.34) et prend la forme (locale)

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(\vec{x}, t) + \text{div } \vec{j}(\vec{x}, t) = 0 \quad (10.35)$$

où $\rho(\vec{x}, t)$ est défini par l'éq. (10.33) et $\vec{j}(\vec{x}, t)$, le courant de probabilité est donné par

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi^*(\vec{x}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}, t) - \left(\vec{\nabla} \Psi(\vec{x}, t) \right)^* \Psi(\vec{x}, t) \right] \quad (10.36)$$

Si le courant de probabilité décroît suffisamment rapidement pour $|\vec{x}| \rightarrow \infty$, le théorème de Gauss appliqué à l'équation (10.35) donne

$$\frac{d}{dt} \int \rho(\vec{x}, t) dV = 0 \quad (10.37)$$

L'équation de Schrödinger *garantit* la conservation de la normalisation donnée par l'éq. (10.34) : si l'amplitude de probabilité est normalisée au temps $t = 0$, elle restera normalisée pour tout $t \geq 0$. La mécanique quantique non relativiste ne décrit que des processus où le nombre de particules est conservé.

La démonstration de toutes les assertions que nous venons de faire est exactement la même que dans le cas unidimensionnel (Chap. III).

2. Observables et Opérateurs

Les propriétés physiques d'un système quantique telles que sa *position*, son *impulsion*, son *moment orbital*, son *énergie* ... sont des "observables". Ce vocable indique que les valeurs de ces quantités sont, en principe, mesurables expérimentalement. En mécanique quantique les observables sont représentées par des *opérateurs* qui agissent sur (et donc modifient) les amplitudes de probabilité $\Psi(\vec{x}, t)$.

Dans l'*espace de configuration*, les opérateurs correspondant à la position et à l'impulsion sont définis par

$$\hat{x} \Psi(\vec{x}, t) = x \Psi(\vec{x}, t) \quad (10.38)$$

$$\hat{p} \Psi(\vec{x}, t) = -i\hbar \vec{\nabla} \Psi(\vec{x}, t) \quad (10.39)$$

Ces définitions sont des généralisations manifestes des opérateurs définis dans le Chapitre III pour le cas unidimensionnel.

Une observable qui nous intéressera plus particulièrement dans le paragraphe suivant est le moment angulaire orbital \hat{L} :

$$\hat{L} \Psi(\vec{x}, t) \stackrel{def}{=} (\hat{x} \wedge \hat{p}) \Psi(\vec{x}, t) \quad (10.40)$$

Explicitement, avec $\hat{\vec{L}} = (\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ nous avons

$$\hat{L}_x \Psi(\vec{x}, t) = -i\hbar y \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial z} + i\hbar z \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial y} \quad (10.41)$$

$$\hat{L}_y \Psi(\vec{x}, t) = -i\hbar z \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial z} \quad (10.42)$$

$$\hat{L}_z \Psi(\vec{x}, t) = -i\hbar x \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial y} + i\hbar y \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial x} \quad (10.43)$$

Enfin, l'observable énergie est représentée par l'opérateur hamiltonien \hat{H} qui, dans le cas qui nous occupe prend la forme

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}})^2}{2m} + \hat{V}(\vec{x}) \quad (10.44)$$

En terme de cet opérateur, l'équation de Schrödinger (Eq. (10.32)) peut s'écrire

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{x}, t) \quad (10.45)$$

Les opérateurs correspondant à des observables physiques sont des opérateurs *linéaires* et *hermitiens*. Il en résulte que leurs valeurs propres sont réelles et que les vecteurs propres correspondant à des valeurs propres distinctes sont orthogonaux. Le temps nous manque pour détailler davantage "l'analyse spectrale" ...

Le lien entre les propriétés observables d'un système quantique et son amplitude de probabilité est, mot pour mot, le même que dans le cas unidimensionnel : pour un système dont l'amplitude de probabilité normalisée est $\Psi(\vec{x}, t)$ la valeur moyenne, à l'instant t , de l'observable A représentée par l'opérateur \hat{A} est donnée par

$$\langle \hat{A} \rangle = \int \Psi^*(\vec{x}, t) \hat{A} \Psi(\vec{x}, t) dV \quad (10.46)$$

Cette expression est à la base de toute comparaison entre théorie et expérience dans le contexte de la mécanique quantique et sa signification est *statistique* : en répétant un grand nombre de fois la mesure d'une observable pour des systèmes quantiques tous préparés dans le même état $\Psi(\vec{x}, t)$, la moyenne de l'ensemble des valeurs mesurées est $\langle \hat{A} \rangle$. La dispersion des valeurs mesurées est caractérisée par l'*incertitude* $\Delta \hat{A}$ définie par

$$(\Delta \hat{A})^2 = \int \Psi^*(\vec{x}, t) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \Psi(\vec{x}, t) dV \quad (10.47)$$

et comme \hat{A} est hermitien, cette expression s'écrit encore

$$(\Delta \hat{A})^2 = \int |(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) \Psi(\vec{x}, t)|^2 dV \quad (10.48)$$

Si dans l'état $\Psi(\vec{x}, t)$ l'observable A a une valeur unique, disons a , alors $\langle \hat{A} \rangle = a$ et $(\Delta \hat{A}) = 0$.

Il en résulte (Eq. (10.48)) que

$$\hat{A} \Psi(\vec{x}, t) = a \Psi(\vec{x}, t) \quad (10.49)$$

Plus précisément $(\Delta\hat{A}) = 0$ si et seulement si $\Psi(\vec{x}, t)$ est un vecteur propre de \hat{A} . Ces considérations illustrent une fois encore l'importance de l'analyse spectrale des opérateurs en mécanique quantique.

Si les opérateurs (hermitiens) \hat{A} et \hat{B} ne commutent pas i.e.

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (10.50)$$

le théorème d'Heisenberg (relations d'incertitude) s'énonce

$$(\Delta\hat{A})(\Delta\hat{B}) \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle| \quad (10.51)$$

Restons-en là pour les considérations générales sur la mécanique quantique à trois dimensions. Le sujet sera étudié en détail dans le cours de 1ère licence.

III Le moment angulaire orbital \hat{L}

Revenons à présent aux opérateurs \hat{L} définis par les équations (10.40) à (10.43). L'importance physique de ces opérateurs vient de la propriété suivante : pour un potentiel central $V(\vec{x}) \equiv V(r)$ avec $r^2 = (x^2 + y^2 + z^2)$ les observables \hat{L} sont des *constantes du mouvement* c'est-à-dire

$$[\hat{H}, \hat{L}] = \left[\frac{(\hat{p})^2}{2m} + \hat{V}(\hat{r}), \hat{L} \right] = 0 \quad (10.52)$$

Ceci est l'expression quantique de la conservation du moment angulaire orbital.

La vérification de l'éq. (10.52) est directe. Par exemple

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_x^2] = 0 \quad [\hat{L}_x, \hat{p}_y^2] = [\hat{L}_x, \hat{p}_y] \hat{p}_y + \hat{p}_y [\hat{L}_x, \hat{p}_y] = 2i\hbar \hat{p}_z \hat{p}_y$$

$$[\hat{L}_x, \hat{p}_z^2] = -2i\hbar \hat{p}_y \hat{p}_z \text{ et par conséquent } [\hat{L}_x, \frac{(\hat{p})^2}{2m}] = 0.$$

D'autre part, pour un potentiel central

$$[\hat{L}_x, V(r)] = -i\hbar y \frac{\partial V(r)}{\partial z} + i\hbar z \frac{\partial V(r)}{\partial y} = -i\hbar y z \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} + i\hbar z y \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = 0$$

et (10.52) est donc vérifié pour \hat{L}_x . La démonstration est semblable pour \hat{L}_y et \hat{L}_z .

La conservation du moment angulaire orbital n'est évidemment pas un résultat inattendu. Ce qui est nouveau, par contre, et caractéristique de la mécanique quantique c'est que les composantes $(\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z)$ du moment angulaire orbital *ne commutent pas* entre elles !

1. L'algèbre du moment angulaire (orbital)

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar \hat{L}_z \quad (10.53)$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar \hat{L}_x \quad (10.54)$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar \hat{L}_y \quad (10.55)$$

Ces relations sont absolument fondamentales dans la physique du moment angulaire (orbital) quantique comme vous le verrez en 1ère licence. Ici, contentons-nous de les vérifier :

$$\begin{aligned} [\hat{L}_x, \hat{L}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y \\ &= -i\hbar \hat{y}\hat{p}_x + i\hbar \hat{x}\hat{p}_y = i\hbar \hat{L}_z \end{aligned}$$

et la vérification de (10.54) et (10.55) est tout à fait semblable.

Il résulte de (10.53) à (10.55) qu'on ne peut pas déterminer simultanément les 3 composantes de $\vec{\hat{L}}$! (Nous serons un peu plus précis dans une remarque à la fin de ce paragraphe !). Il n'y a donc *pas de sens* en mécanique quantique de parler de la “direction” du moment angulaire orbital.

Par contre, le “carré de la longueur de $\vec{\hat{L}}$ ” garde un sens géométrique. En effet, l'opérateur

$$(\vec{\hat{L}})^2 = \vec{\hat{L}} \cdot \vec{\hat{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \quad (10.56)$$

représente une observable (c'est un opérateur linéaire et hermitien). Par ailleurs, cet opérateur commute avec $\vec{\hat{L}}$:

$$[(\vec{\hat{L}})^2, \vec{\hat{L}}] = 0 \quad (10.57)$$

soit encore

$$[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_z] = 0.$$

En effet, $[\hat{L}_x, \hat{L}_x^2] = 0$; $[\hat{L}_x, \hat{L}_y^2] = i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z$ et $[\hat{L}_x, \hat{L}_z^2] = -i\hbar \hat{L}_y \hat{L}_z - i\hbar \hat{L}_z \hat{L}_y$ et par conséquent $[\hat{L}_x, (\vec{\hat{L}})^2] = 0$ et il en va de même pour \hat{L}_y et \hat{L}_z .

Des équations (10.52) et (10.57) il résulte que l'ensemble $\{\hat{H}, (\vec{\hat{L}})^2, \hat{L}_z\}$ est un *ensemble d'observables compatibles* : pour une particule quantique soumise à un potentiel central, on peut déterminer avec précision (et simultanément) son énergie, le carré de son moment angulaire orbital et la valeur d'une composante de ce moment angulaire orbital (conventionnellement choisie comme la composante z de $\vec{\hat{L}}$).

2. Le spectre de $(\hat{L})^2$ et de \hat{L}_z

Il nous reste à déterminer le spectre des opérateurs $(\hat{L})^2$ et \hat{L}_z c'est-à-dire à déterminer tous les nombres λ et μ et toutes les fonctions $\phi_{\lambda,\mu}$ telles que

$$(\hat{L})^2 \phi_{\lambda,\mu} = \hbar^2 \lambda \phi_{\lambda,\mu} \quad (10.58)$$

$$\hat{L}_z \phi_{\lambda,\mu} = \hbar \mu \phi_{\lambda,\mu}. \quad (10.59)$$

Tout comme dans le cas bidimensionnel, la résolution de ces équations aux valeurs propres est simplifiée par passage aux coordonnées sphériques (r, θ, φ) c'est-à-dire

$$x = r \sin \theta \cos \varphi \quad (10.60)$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi \quad (10.61)$$

$$z = r \cos \theta \quad (10.62)$$

et inversement

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \quad (10.63)$$

$$\cos \theta = \frac{z}{r} \quad (10.64)$$

$$\tan \varphi = \frac{y}{x} \quad (10.65)$$

et notre première tâche est d'exprimer les opérateurs \hat{L} en "coordonnées sphériques". Le calcul est long mais ne présente pas de difficulté particulière. Nous commençons par exprimer les composantes du gradient $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$ en coordonnées sphériques

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial r}{\partial x} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (10.66)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial r}{\partial y} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (10.67)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial r}{\partial z} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial \theta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\partial \varphi}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.68)$$

À partir de (10.63) - (10.65) nous obtenons

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi & \frac{\partial r}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi & \frac{\partial r}{\partial z} &= \cos \theta \\ \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} & \frac{\partial \theta}{\partial z} &= -\frac{\sin \theta}{r} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial x} &= -\frac{1 \sin \varphi}{r \sin \theta} & \frac{\partial \varphi}{\partial y} &= \frac{1 \cos \varphi}{r \sin \theta} & \frac{\partial \varphi}{\partial z} &= 0. \end{aligned}$$

Et par conséquent

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x} &= \sin \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \cos \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\sin \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta \sin \varphi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \varphi}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta}.\end{aligned}$$

Utilisant ces formules et les relations (10.60) - (10.62), on calcule

$$\hat{L}_x = yp_z - zp_y = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cotan \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (10.69)$$

$$\hat{L}_y = zp_x - xp_z = \frac{\hbar}{i} \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cotan \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (10.70)$$

$$\hat{L}_z = xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (10.71)$$

Et un calcul un peu long mais élémentaire donne finalement

$$(\hat{L})^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} Y_{\lambda, \mu}(\theta, \varphi) = \hbar^2 \lambda Y_{\lambda, \mu}(\theta, \varphi) \quad (10.72)$$

Comme les composantes cartésiennes de \vec{L} et $(\hat{L})^2$, exprimés en coordonnées polaires dans les équations (10.69) - (10.72) dépendent uniquement de θ et φ (et plus de r), les fonctions propres de $(\hat{L})^2$ et de \hat{L}_z seront également des fonctions de θ et φ uniquement.

L'équation aux valeurs propres (Eq. (10.58)) peut donc s'écrire

$$-\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] Y_{\lambda, \mu}(\theta, \varphi) = \lambda Y_{\lambda, \mu}(\theta, \varphi) \quad (10.73)$$

et cette équation a été discutée et résolue dans le cours de physique théorique et mathématique. Nous résumons ici les résultats obtenus : l'équation (10.73) admet des solutions finies et monovaluées uniquement pour certaines valeurs de λ . Ces valeurs propres sont données par

$$\lambda = \ell(\ell + 1) \quad \text{où } \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (10.74)$$

La valeur propre $\ell(\ell + 1)$ est $(2\ell + 1)$ fois dégénérée. Nous définissons les *harmoniques sphériques* $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$ comme les solutions de l'éq. (10.73) qui sont simultanément fonctions propres de \hat{L}_z c'est-à-dire

$$(\hat{L})^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (10.75)$$

$$\hat{L}_z Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \hbar m Y_\ell^m(\theta, \varphi) \quad (10.76)$$

où

$$m = \ell, \ell - 1, \ell - 2, \dots, -(\ell - 2), -(\ell - 1), -\ell$$

$$\text{et } \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Les éqs (10.75) et (10.76) avec les domaines de valeurs pour ℓ et m sont la *solution complète* du spectre de $(\hat{\vec{L}})^2$ et \hat{L}_z . Elles expriment la “quantification” du moment angulaire orbital en mécanique quantique : les seules valeurs propres possibles de $(\hat{\vec{L}})^2$ sont données par une des valeurs de l’ensemble discret suivant

$$\hbar^2 \ell(\ell + 1) \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

et pour ℓ fixé, les seules valeurs propres possibles de \hat{L}_z sont une des $(2\ell + 1)$ valeurs $\hbar m$ avec $m = \ell, \ell - 1, \dots, -(\ell - 1), -\ell$.

3. Quelques remarques

- 1) Les harmoniques sphériques sont des états propres *simultanés* de $(\hat{\vec{L}})^2$ et de \hat{L}_z de valeurs propres précises données dans les Eqs. (10.75) et (10.76).

Pour des raisons historiques ℓ et m sont souvent appelés des “nombres quantiques” : ℓ est le nombre quantique de moment angulaire et m le nombre quantique magnétique. Cette dernière appellation est due à l’importance du “nombre quantique m ” dans les interactions entre atomes et les champs magnétiques (Stern-Gerlach n’en est qu’un premier exemple).

Par abus de langage on emploie souvent l’expression “la particule quantique est dans un état de moment angulaire ℓ ” pour décrire la situation où la particule quantique est dans un des états propres de $(\hat{\vec{L}})^2$ correspondant à la valeur propre $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$. Pour des états de l’électron avec $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ on utilise également les expressions : un électron dans l’état $S(\ell = 0)$, dans un état $P(\ell = 1)$, dans un état $D(\ell = 2)$, dans un état $F(\ell = 3)$ et on continue alors dans l’ordre alphabétique : état $G(\ell = 4)$, état $H(\ell = 5)$ et ainsi de suite. Cette nomenclature est souvent désignée comme la “notation spectroscopique”.

- 2) Il y a plusieurs “effets quantiques” remarquables dans l’algèbre du moment angulaire orbital. Tout d’abord la “longueur” de \vec{L} , donnée par $\hbar \sqrt{\ell(\ell + 1)}$, est toujours strictement supérieure à la “longueur” maximale de $\hat{L}_z, \hbar \ell$ (pour tout ℓ fixé, sauf $\ell = 0$). D’autre part, la “direction” de $\hat{\vec{L}}$ n’a pas de sens. Ces propriétés résultent des Eqs. (10.53)-(10.55). Une autre manière d’exprimer ces effets quantiques est en termes des relations d’incertitude

$$(\Delta \hat{L}_i)(\Delta \hat{L}_j) \geq \frac{1}{2} | \langle \hat{L}_k \rangle | \quad (10.77)$$

avec i, j, k des indices *différents* pris parmi les composantes x, y, z de $\hat{\vec{L}}$.

Comme nous l'avons déjà signalé l'éq. (10.77) implique qu'il est impossible de spécifier simultanément les valeurs des trois composantes de $\vec{\hat{L}}$ *sauf si* $\ell = 0$. Dans ce dernier cas, $Y_0^0(\theta, \varphi) = \text{cte}$ est un vecteur propre de \hat{L}_x, \hat{L}_y et \hat{L}_z (de valeur propre 0). Il est aisé de démontrer que c'est le *seul cas* avec cette propriété. En effet si $\Delta \hat{L}_i = 0$ en vertu de (10.77), $\langle L_i^2 \rangle = \langle L_i \rangle^2 = 0$ et par conséquent $\langle L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \rangle = 0$ sauf encore (par suite de l'hermiticité) $\vec{L}\Psi = 0$ cqfd.

De ce qui précède nous devons conclure que lorsqu'une particule quantique est dans un état propre de \hat{L}_z , elle est dans un état pour lequel il n'y a pas de valeur précise de \hat{L}_x et \hat{L}_y . C'est une autre manière d'exprimer que l'observable \hat{L}_z est compatible avec $(\vec{\hat{L}})^2$ mais n'est pas compatible avec \hat{L}_x et \hat{L}_y ! Inutile d'insister sur le fait que cette situation est radicalement différente de la situation classique où $(\vec{L})^2$ et L_x, L_y, L_z ont des valeurs précises, *continues* et soumises à la seule restriction que $(\vec{L})^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$. Bien entendu, classiquement, l'orientation de \vec{L} est bien définie et il y a des situations où la longueur de \vec{L} est égale à la longueur d'une de ses composantes !

- 3) Dans la discussion de ce paragraphe, il semblerait que \hat{L}_z soit quelque peu particulier et les harmoniques sphériques, par exemple, ne sont pas "symétriques" en $x y z$. Cette asymétrie vient uniquement du *choix* de l'axe "polaire" dans la définition des "coordonnées sphériques". Rien ne nous empêche de prendre l'axe Ox ou l'axe Oy comme axe "polaire" ou de rebaptiser les axes de coordonnées : $Ox \rightarrow Oy, Oy \rightarrow Oz, Oz \rightarrow Ox$. Ce simple changement de "nom" des axes de coordonnées, change \hat{L}_z en \hat{L}_x etc... De cet argument il résulte en particulier que le spectre de \hat{L}_x et \hat{L}_z ainsi que de \hat{L}_y est exactement identique (les *valeurs propres* sont les mêmes) et bien entendu $(\vec{\hat{L}})^2$ et \hat{L}_x (ou \hat{L}_y) sont compatibles au même titre que $(\vec{\hat{L}})^2$ et \hat{L}_z .

4) Quelques propriétés des harmoniques sphériques

- a) La définition précise des harmoniques sphériques est la suivante

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = N_\ell^m P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad \ell = 0, 1, \dots$$

$$m = \ell, \ell - 1, \dots, -\ell$$

où $P_\ell^m(\cos \theta)$ sont les fonctions associées de Legendre définies par

$$P_\ell^m(\mu) = \frac{1}{2^\ell \ell!} (1 - \mu^2)^{|m|/2} \frac{d^{\ell+|m|}}{d\mu^{\ell+|m|}} \left[(\mu^2 - 1)^\ell \right]$$

et N_ℓ^m , le facteur de normalisation, est explicitement

$$N_\ell^m = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left(\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \right)^{1/2}$$

Ainsi

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad Y_1^{\pm 1}(\theta, \varphi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

- b) Les harmoniques sphériques sont des fonctions *orthogonales* sur la sphère (de rayon 1)

$$\int d\Omega Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

$$d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi \quad \text{et} \quad 0 \leq \theta \leq \pi \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi$$

- c) Les harmoniques sphériques forment une *base* de l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable sur la sphère si $\int |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega$ est fini, alors

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} C_{\ell m} Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

et en vertu des relations d'orthogonalité

$$C_{\ell m} = \int d\Omega Y_\ell^{m*}(\theta, \varphi) f(\theta, \varphi)$$

- d) *Parité*.

Sous l'opération parité P ,

$$\vec{x} \xrightarrow{P} -\vec{x}.$$

En coordonnées cartésiennes, cette transformation est

$$(x, y, z) \xrightarrow{P} (-x, -y, -z).$$

En coordonnées sphériques, la même transformation est définie par

$$(r, \theta, \varphi) \xrightarrow{P} (r, \pi - \theta, \varphi + \pi)$$

et en vertu des formules de la remarque a)

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) \xrightarrow{P} (-1)^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi).$$

Remarquons encore que $\vec{p} \xrightarrow{P} -\vec{p}$ et $\vec{L} \xrightarrow{P} \vec{L}$

- e) le lien entre harmoniques sphériques et la théorie des représentations du groupe des rotations $SO(3)$ a été explicité dans le cours de physique théorique et mathématique.

5) *L'expérience de Stern Gerlach*

Si la déviation d'un faisceau atomique dans un champ magnétique inhomogène était due au moment magnétique associé au *moment angulaire orbital*, on observerait une séparation du faisceau initial en un *nombre impair* $(2\ell + 1)$ de faisceaux.

L'expérience de Stern-Gerlach telle qu'elle a été décrite au Chapitre IX avec la séparation du faisceau en 2 faisceaux ne peut être expliquée qu'en faisant appel au moment angulaire intrinsèque c'est-à-dire au *spin* de l'électron. $(\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ les composantes de l'opérateur $\hat{\vec{S}}$ (spin de l'électron) satisfont les relations de commutation $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$; $[\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x$; $[\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y$. Les valeurs propres de \hat{S}_z sont $\pm\frac{1}{2}\hbar$ tandis que la valeur propre de $(\hat{\vec{S}})^2$ est $\hbar^2\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4}\hbar^2$. Mais ceci est “une autre histoire” (R. Kipling).