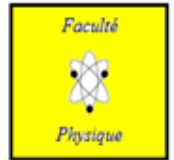




UNIVERSITE DE SCIENCES ET TECHNOLOGIE D'ORAN M. BOUDIAF

FACULTE DE PHYSIQUE

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE ENERGETIQUE



NOTES DE COURS

INITIATION A LA MECANIQUE QUANTIQUE

2^{eme} ANNEE LICENCE DE PHYSIQUE

RAHMOUNI MAWAHIB

2019-2020

Avant-propos

La mécanique quantique est une science née au vingtième siècle, à la suite d'expériences réalisées essentiellement pour sonder l'infiniment petit, et dont les résultats contredisaient complètement les prédictions de la physique de l'époque, que nous appelons aujourd'hui 'la physique classique'. Cette nouvelle branche de la physique a provoqué un bouleversement profond et inédit, en imposant des idées étranges et mystérieuses. Elle nous apprend par exemple qu'à l'échelle microscopique, une particule n'est pas un objet localisable en un point de l'espace, dont nous pouvons savoir la vitesse et par suite déterminer la trajectoire. C'est plutôt une chose étendue dont la position et la vitesse ne peuvent être connues qu'avec une certaine incertitude, et qui peut interférer avec d'autres particules. Ce n'est pas tout à fait une onde. Ce n'est pas non plus un corpuscule. C'est les deux à la fois ! Cette dualité onde –corpuscule avait d'abord été découverte pour la lumière avant d'être étendue à une particule matérielle. Ainsi, particule de lumière et particule de matière sont décrites par une fonction d'onde qui donne une description de toutes les propriétés des systèmes qu'elles constituent. Cependant, elle ne permet de prédire que des probabilités lors d'une mesure qu'un système peut subir. Et lors de toute mesure, ce système est perturbé d'une manière incontrôlée et la fonction d'onde subit un saut imprévisible ! Cet indéterminisme heurte le bon sens. Il a donc été difficile à accepter par les physiciens. Néanmoins, à ce jour, aucune expérience n'a réussi à mettre en échec la mécanique quantique.

La mécanique quantique a été formulée entre 1925 et 1927 par un ensemble de physiciens (Schrödinger, Heisenberg, Dirac, Bohr et Pauli). Leurs efforts ont conduit à une interprétation qu'on appelle 'interprétation de l'Ecole de Copenhague'. Dans cette interprétation, on renonce aux principes de déterminisme et de causalité pour une physique indéterministe à vision probabiliste, mais dont les succès ont été fulgurants. En effet, la mécanique quantique a permis de comprendre et d'interpréter une multitude de phénomènes. Aujourd'hui, elle constitue un outil indispensable pour une compréhension approfondie de la majorité des phénomènes physiques et par conséquent doit faire partie intégrante du bagage intellectuel des étudiants.

Ce cours d'initiation à la mécanique quantique est celui que j'enseigne à la faculté de physique à l'USTO_MB depuis cinq années. Il s'adresse aux étudiants de deuxième année (option : Sciences de la matière). Le contenu du programme officiel est riche. Toutefois, avec une seule séance de cours et une seule séance de travaux dirigés par semaine, il me semble que c'est difficile d'en transmettre la totalité. C'est la raison qui m'a poussée à réaliser ce polycopié. J'ai essayé de le rédiger d'une manière aussi claire que possible afin qu'il soit, je l'espère, accessible à tous les étudiants. Son contenu est donc limité. Ce cours nécessite une bonne maîtrise des mathématiques et de la physique du point enseignés en première année

ainsi que de la mécanique analytique enseignée en deuxième année. Il a été structuré en 4 chapitres.

Le chapitre 1 décrit les expériences qui ont conduit à la naissance de la mécanique quantique. Il montre comment leur interprétation a conduit à la dualité onde-corpuscule. Il introduit la notion de fonction d'onde et l'équation d'onde pour une particule matérielle.

Le chapitre 2 permet aux étudiants de s'initier aux idées de la mécanique quantique. Il traite des problèmes dans lesquels la nature ondulatoire des particules joue un rôle essentiel. En dépit de leur simplicité du point de vue mathématique, les exemples choisis illustrent des idées et des principes très importants.

Le chapitre 3 contient le formalisme mathématique indispensable pour aborder les bases de la mécanique quantique.

Le chapitre 4 énonce les postulats de la mécanique quantique. Ceux-ci seront structurés en six parties. Des applications illustrant le contenu physique de l'équation de Schrödinger seront traitées.

Des applications telles que l'étude de l'oscillateur harmonique, le moment cinétique et l'atome d'hydrogène seront traitées en troisième année. Ce cours constitue un bagage indispensable aussi bien pour aborder des ouvrages plus complets dans ce domaine, que pour affronter le programme de la mécanique quantique de la troisième année.

Je serai profondément reconnaissante à tous ceux qui me signaleront les erreurs ou qui me feront des remarques ou des suggestions pour améliorer le contenu de ces notes de cours.

Dr RAHMOUNI Mawahib
Maitre de Conférence B
Faculté de physique, Département de physique énergétique
Université des Sciences et de Technologie d'Oran M. BOUDIAF
e-mail: mawahib_b@yahoo.fr

Table des matières

Chapitre1. De la mécanique classique à la mécanique quantique

1.1 Situation de la physique avant la fin du 19 ^{ième} siècle.....	8
1.2 Corps noir	9
1.2.1 Expérience du corps noir	9
1.2.2 Interprétation classique	10
1.2.3 L'idée de Planck	11
1.3 Effet photoélectrique	12
1.3.1 Expérience	12
1.3.2 Interprétations classiques	13
1.3.2 L'idée d'Einstein	14
1.4 Effet Compton	15
1.4.1 Expérience	15
1.4.2. Interprétation de Compton	15
1.5. Les fentes d'Young	18
1.5.1. Expérience	18
1.5.2. Dualité onde-corpuscule	20
1.6. Stabilité de l'atome et spectres atomiques.....	21
1.6.1. Modèle de Rutherford	21
1.6.2. Modèle de Bohr	22
1.6.3. Expérience de Franck et Hertz	22
1.7. Aspect ondulatoire pour la matière	25
1.7.1. Postulat de De Broglie	25
1.7.2. Fonction d'onde pour une particule matérielle	26

1.7.3. Equation de Schrödinger	26
1.8. Principes d'incertitude de Heisenberg	27
Exercices.....	29
Chapitre 2. Particule dans un potentiel stationnaire	
2.1 Introduction.....	31
2.2 Equation de Schrödinger indépendante du temps	31
2.3 Conditions de continuité aux interfaces.....	32
2.4 Marche de potentiel	33
2.5 Puits de potentiel infini symétrique	38
2.6 Puits de potentiel infini non symétrique.....	41
2.7 Particule libre dans une boite cubique	42
2.8 Barrière de potentiel, effet tunnel	44
Exercices.....	47
Chapitre3. Outils mathématiques de la mécanique quantique	
3.1 Espace des fonctions d'onde d'une particule	49
3.1.1 Définition	49
3.1.2 Bases orthonormées dans F	49
3.1.3 Produit scalaire	50
3.1.4 Fonction de Dirac	50
3.1.5 Bases qui n'appartiennent pas à F	51
3.1.5.1 Ondes planes	51
3.1.5.2 Fonction Delta	53
3.2 Espace des états. Notation de Dirac	53
3.2.1 Kets et bras	53
3.2.2 Relations caractéristiques d'une base orthonormée	54
3.2.3 Quelques propriétés	54
3.2.4 Opérateurs linéaires	54
3.2.4.1 Définition.....	54

3.2.4.2	Commutateur de deux opérateurs	55
3.2.4.3	Projecteur sur un ket normé	55
3.2.4.4	Projecteur sur un sous espace vectoriel.....	56
3.2.4.5	Opérateur adjoint	56
3.2.4.6	Conjugaison hermitique	57
3.2.4.7	Opérateur hermitique	57
3.3	Equations aux valeurs propres. Observables	58
3.3.1	Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur	58
3.3.1.1	Définition	58
3.3.1.2	Equation caractéristique	59
3.3.1.3	Exemples d'applications.....	59
3.3.2	Observable	54
3.3.3	Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC)	55
3.3.3.1	Définition	55
3.3.3.2	Exemple d'application	55
3.4	Les représentations $\{ x\rangle\}$ et $\{ p\rangle\}$	67
3.5	Les observables X et P_x	68
3.5.1	Définition de X	68
3.5.2	Définition de P_x	68
	Exercices.....	70
Chapitre 4. Les postulats de la mécanique quantique		
4.1	Introduction	72
4.2	Enoncés des postulats.....	72
4.2.1	Premier postulat	72
4.2.2	Deuxième postulat	72
4.2.3	Troisième postulat	72

4.2.4 Quatrième postulat	72
4.2.4.1 Cas d'un spectre discret	72
4.2.4.2 Cas d'un spectre continu	74
4.2.4.3 Valeur moyenne d'une observable	75
4.2.4.3 Ecart quadratique moyen	75
4.2.5 Cinquième postulat	75
4.2.6 Sixième postulat	77
4.3 Evolution de la valeur moyenne d'une observable	77
4.4 Théorème d'Ehrenfest	78
4.5 Systèmes conservatifs	80
4.5.1 Résolution de l'équation de Schrödinger	80
4.5.2 Constantes du mouvement	82
4.5.3 Fréquences de Bohr d'un système	82
4.5.4 Relation d'incertitude temps-énergie	83
Exercices.....	85
Références.....	87

Chapitre 1 De la mécanique classique à la mécanique quantique

1.1 Situation de la physique avant la fin du 19^{ième} siècle :

Dans le but de comprendre les phénomènes physiques qui nous entourent, les physiciens se sont mis à étudier la lumière et la matière. Leur vision sur la nature de ces deux entités a évolué dans le temps.

La nature de la matière :

A l'antiquité déjà, on avait émis l'hypothèse que la matière serait constituée de petites particules indivisibles, mais cette hypothèse n'a pas été dominante pour les penseurs grecs. Au XVII^e, Newton avait repris cette idée. Il avait écrit : « *Il me semble probable qu'au commencement, Dieu créa la matière en particules pleines, massives, dures, impénétrables et mobiles ...* »

Au cours du temps, l'hypothèse atomique s'est renforcée. En chimie, on avait remarqué que les substances se combinent en proportions fixes pour donner de nouveaux composés. En thermodynamique, on pouvait expliquer la pression par les chocs de particules sur les parois. A la fin du XIX^e siècle, tous les physiciens étaient convaincus de l'existence des atomes. Cependant, à cette époque, on disait que ces atomes sont parfaitement localisables dans l'espace, que leur mouvement est décrit par les lois de Newton et surtout, que pour n'importe quelle particule, si on connaît à un instant les variables dynamiques, c'est-à-dire la position et la quantité de mouvement, alors on sera en mesure de déduire ces variables dynamiques à n'importe quel instant ultérieur, ce qui bien entendu permet de déterminer la trajectoire. La vision du monde était déterministe, basée sur le principe de causalité.

La nature de la lumière :

Pour Newton, la lumière est constituée de corpuscules. Mais, pour Huygens, qui était le contemporain de Newton, la lumière est plutôt une onde. Cependant, c'est l'hypothèse corpusculaire qui a été dominante jusqu'au début du XIX^e siècle. C'est-à-dire, jusqu'au jour où Young a réalisé sa célèbre expérience des 'fentes d'Young'. Il a obtenu des images d'interférence avec la lumière ce qui a permis de valider l'hypothèse ondulatoire.

En parallèle, des progrès avaient été réalisés en électricité et en magnétisme. Faraday avait observé les lignes formées par la limaille de fer au voisinage d'un aimant ce qui a permis d'introduire la notion de champ. Ensuite, Maxwell en 1873 a formulé l'ensemble de tous les phénomènes électriques et magnétiques en seulement quatre équations. La solution de ces équations est une onde transverse dont les variables oscillantes sont les champs électrique et magnétique. Cette onde se déplace à la vitesse constante qui est celle de la lumière.

On avait déduit alors que la lumière (et plus généralement le rayonnement) n'est rien d'autre qu'une onde électromagnétique de fréquence appropriée.

Ainsi, à la fin du XIX^e siècle, nul ne doutait du fait que la lumière est une onde et que la matière est constituée par des corpuscules. La matière est régie par les lois de Newton tandis que la lumière obéit à la théorie de Maxwell. Tous les phénomènes physiques connus à cette époque s'expliquaient bien dans le cadre de ces deux disciplines qui forment ce qu'on appelle 'la mécanique classique'. Les physiciens pensaient être sur le point de comprendre tous les phénomènes physiques de l'univers. Mais cet optimisme allait bientôt être brisé !

En effet, à l'aube du XX^e siècle et avec les progrès de la technologie, il apparut des phénomènes nouveaux que la physique classique ne pouvait plus expliquer. Dans les paragraphes suivants nous allons décrire certains de ces phénomènes.

1.2 Corps noir :

1.2.1 Expérience du corps noir :

Un corps noir est une cavité dont les parois sont suffisamment rugueuses pour ne pas réfléchir le rayonnement. Portées à une température T , ces parois vont émettre un rayonnement qui sera réabsorbé par d'autres parties du corps noir jusqu'à atteindre un équilibre où tout le rayonnement émis est réabsorbé. Au fur et à mesure que la température augmente, les parois changent de couleur en passant du rouge au jaune, ensuite au bleu ... On peut le voir en perçant un petit trou sur la surface, ce qui permettra aussi de mesurer pour différentes valeurs de la température, la densité d'énergie émise pour chaque fréquence comprise entre ν et $\nu + d\nu$, autrement dit, la répartition spectrale du rayonnement émis par un corps noir. On obtient alors les courbes représentées dans la figure 1.1.

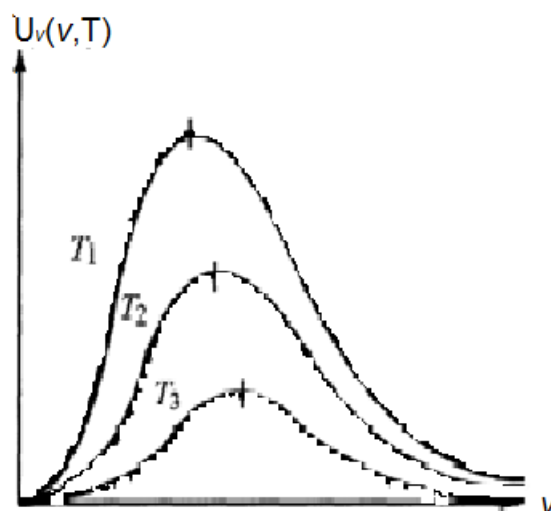


Fig.1.1 Spectre du rayonnement du corps noir

$$(T_1 > T_2 > T_3)$$

Les courbes tendent vers zéro pour les faibles et les grandes longueurs d'onde et passent par un maximum pour une longueur d'onde λ_{\max} qui diminue lorsque la température augmente, tout en vérifiant la relation suivante :

$$\lambda_{\max} T = 0,2898 \text{ cmK} \quad (1.1)$$

Cette relation s'appelle 'loi de déplacement de Wien'.

1.2.2 Interprétation classique :

Au début on avait essayé de retrouver la forme de ces courbes en se basant sur la théorie classique du rayonnement et la physique statistique. Rayleigh et Jeans ont alors considéré que le champ électromagnétique est dû à des oscillateurs qui vibrent. Dans ce cas, la densité d'énergie est :

$$U(\nu, T) = N(\nu) \langle E(\nu, T) \rangle \quad (1.2)$$

$N(\nu)$ est le nombre d'oscillateurs par unité de volume et $\langle E(\nu, T) \rangle$ est l'énergie moyenne par oscillateur. En physique statistique on montre que :

$$N(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \quad (1.3)$$

Et l'énergie moyenne par oscillateur :

$$\langle E(\nu, T) \rangle = kT \quad (1.4)$$

$$\text{D'où : } U(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (1.5)$$

Certes, cette théorie explique la partie parabolique de ces courbes qu'on observe aux basses fréquences mais pas la retombée aux hautes fréquences (figure 1.2). Cette équation présente un autre problème. Si on intègre la densité d'énergie sur toutes les fréquences, on trouve l'infini, ce qui est inacceptable. C'est ce qu'on appelle 'la catastrophe ultraviolette'

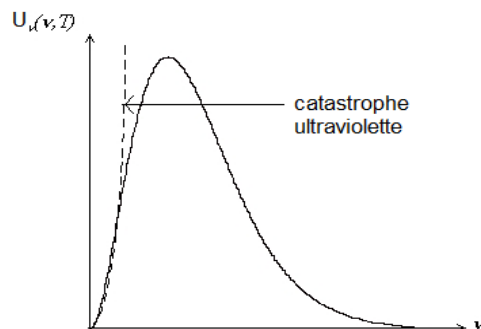


Figure 1.2. Comparaison entre la courbe expérimentale et celle obtenue par Rayleigh et Jeans

Pour décrire le comportement du corps noir aux hautes fréquences, Wien a proposé la loi empirique suivante :

$$U_\nu(\nu, T) = A \nu^3 e^{-\frac{B\nu}{T}} \quad (1.6)$$

A et B étant des constantes.

1.2.3 L'idée de Planck :

Devant l'incapacité d'expliquer le comportement du corps noir par des considérations classiques, Planck a émis une idée révolutionnaire. Il a considéré que l'énergie de chaque oscillateur ne peut prendre que des valeurs multiples de la quantité $h\nu$. Autrement dit, $E_\nu = nh\nu$. Et par suite, les échanges d'énergie entre le rayonnement et la matière se font d'une manière discontinue. Il a alors obtenu l'expression suivante :

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{C^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1.7)$$

h s'appelle la constante de Planck, C est la vitesse de la lumière.

Dans le cas des basses fréquences, on peut faire un développement limité de l'exponentielle, ce qui donne :

$$\begin{aligned} U(\nu, T) &= \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)^{-1} \\ &\approx \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \left(1 + \frac{h\nu}{kT} - 1 \right)^{-1} \\ &= \frac{8\pi \nu^2}{c^3} kT \end{aligned}$$

On retrouve l'expression (1.5) de Rayleigh et Jeans.

Pour les hautes fréquences, $e^{\frac{h\nu}{kT}} \gg 1$

$$\text{Ce qui donne : } U(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} e^{-\frac{h\nu}{kT}} \quad (1.8)$$

Ce qui permet de retrouver la loi empirique de Wien (1.6).

$$\text{On pose } X = \frac{h\nu}{kT}$$

$$\lim_{X \rightarrow \infty} \frac{8\pi h k^3}{h^3} X^3 e^{-X} = 0$$

La densité d'énergie tend vers zéro pour les hautes fréquences.

Ainsi l'expression trouvée par Planck décrit bien le comportement du corps noir aussi bien aux hautes qu'aux basses fréquences. Cependant, on a vu que cette expression est basée sur une idée complètement contradictoire avec la théorie classique du rayonnement car celle-ci conduit à des échanges d'énergie continus entre le rayonnement et la matière. Nous allons voir que l'expérience du corps noir n'est pas la seule à remettre en cause la théorie classique.

1.3 Effet photoélectrique :

1.3.1 Expérience :

Une cellule photoélectrique est constituée d'une enceinte transparente dans laquelle il y'a un vide poussé et deux plaques : Une cathode C et une anode A. Les deux plaques sont reliées à un générateur de façon à établir une ddp U_{AC} (figure 1.3)

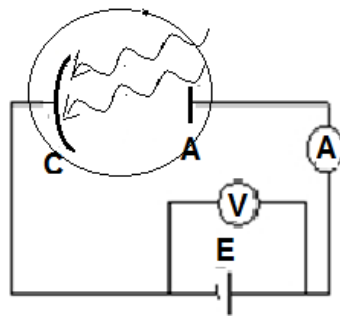


Fig.1.3. Cellule photoélectrique

Lorsqu'on éclaire la photocathode par une lumière monochromatique, il apparaît instantanément un courant I dans le circuit. Mais ce courant n'apparaît que si la fréquence de la radiation incidente $\nu \geq \nu_0$ telle que ν_0 est une constante qui caractérise la cathode. C'est la fréquence seuil. Dans le cas où $\nu < \nu_0$ aucun courant n'apparaît quelque soit l'intensité de l'onde lumineuse et la durée de l'éclairement. On a fait des mesures qui ont donné les courbes représentées dans les figures(1.4) et (1.5).

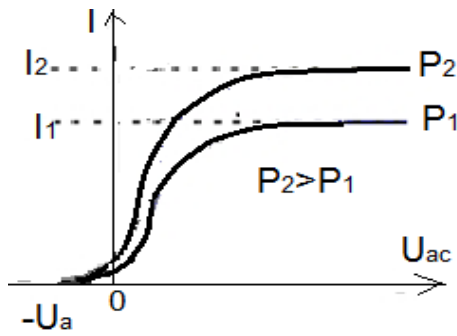


Fig.(1.4) Caractéristique d'une cellule photoélectrique pour une fréquence donnée.

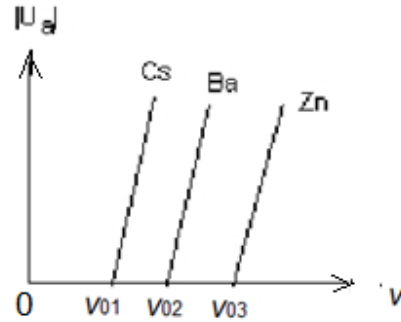


Fig.(1.5) Variation du potentiel d'arrêt en fonction de la fréquence.

On remarque que :

1-Si U_{ac} augmente, alors I augmente aussi et tend vers une limite : Intensité de saturation. Celle-ci augmente avec la puissance du faisceau incident (Fig.(1.4)).

2-Si on applique une certaine tension négative $U_{AC} = -U_a$, le courant s'annule. U_a s'appelle le potentiel d'arrêt. U_a augmente avec la fréquence du rayonnement.(Fig.(1.5))

1.3.2 Interprétations classiques :

Les électrons de la cathode accumulent de l'énergie apportée par le champ électromagnétique, ensuite, ils quittent le métal. Si U_{AC} augmente, les électrons sont plus accélérés vers l'anode (ils ne s'accumulent pas) et donnent naissance à un courant plus grand jusqu'à la saturation.

Si U_{AC} est négative, les électrons reviennent vers la cathode et le courant s'annule.

En appliquant le théorème de l'énergie cinétique entre l'anode et la cathode, on écrit :

$$\Delta E_c = E_{cA} - E_{cC} = \sum W_{\vec{F}} \quad (1.9)$$

E_{cA}, E_{cC} représentent respectivement l'énergie cinétique des électrons au niveau de l'anode et de la cathode. Dans ce cas, il n'y a qu'une seule force : la force électrique. C'est une force conservative et par conséquent,

$$W_{\vec{F}} = -\Delta E_P = E_{PC} - E_{PA} = -e(U_C - U_A) = -eU_{CA} \quad (1.10)$$

En combinant les équations (1.9) et (1.10) on obtient :

$$\frac{1}{2} mV_A^2 - \frac{1}{2} mV_C^2 = -eU_{CA} = eU_{AC} \quad (1.11)$$

Si $V_A = 0$, alors

$$\frac{1}{2}mV_C^2 = -e(-U_a) = eU_a$$

$$U_a = \frac{1}{2} \frac{m}{e} V_C^2 \quad (1.12)$$

La mécanique classique explique l'apparition du courant et le potentiel d'arrêt. Néanmoins, un problème persiste. Si la fréquence du rayonnement incident est inférieure à la fréquence seuil le courant n'apparaît pas dans le circuit quelque soit la puissance de ce rayonnement incident. Ce phénomène, la mécanique classique est incapable de l'expliquer.

1.3.2 L'idée d'Einstein :

En 1905, Einstein postule que le champ électromagnétique est constitué d'agglomérations (ou de quantas) d'énergie appelés photons. Chacun porte une énergie E telle que :

$$E = h\nu \quad (1.13)$$

ν étant la fréquence de l'onde électromagnétique.

Si un électron du métal absorbe un photon, il acquiert un quantum d'énergie $h\nu$. Une partie de cette énergie (W_s) sert à quitter le métal et l'autre se transforme en énergie cinétique. L'équation de conservation de l'énergie s'écrit alors:

$$h\nu = W_s + \frac{1}{2}mV_C^2 \quad (1.14)$$

Si $h\nu < W_s$, alors l'électron ne peut pas être libéré. Il ne peut y avoir effet photoélectrique que si la condition $\nu \geq \nu_s$ est satisfaite, $\nu_s = \frac{W_s}{h}$ est la fréquence seuil. Si on augmente la puissance du rayonnement, on augmente le nombre de photons mais pas la fréquence du rayonnement. Les photons ont tous la même énergie $h\nu$ insuffisante pour que l'électron se libère.

Les relations (1.12) et (1.14) donnent :

$$U_a = \frac{h\nu}{e} - \frac{W_s}{e} \quad (1.15)$$

La mécanique quantique explique donc les courbes (1.4) et (1.5).

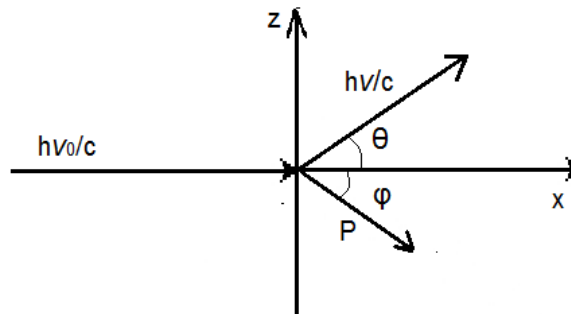
En conclusion, le seul moyen d'expliquer l'effet photoélectrique est de considérer que la lumière a un aspect corpusculaire.

1.4 Effet Compton :

L'expérience du corps noir montre que l'énergie de l'onde électromagnétique est quantifiée. L'effet photoélectrique montre que lors de l'interaction rayonnement-matière, l'onde se comporte comme un faisceau de corpuscules (photons) dont l'énergie est $h\nu$. L'effet Compton complète cette description en montrant que ces photons possèdent aussi une impulsion.

1.4.1 Expérience :

Compton envoie sur un bloc de matière un faisceau de rayons X monochromatique de longueur d'onde λ , dans une direction bien définie (direction Ox). Il recueille la partie du rayonnement diffusée dans une direction faisant un angle θ avec la direction incidente (fig(1.6)).



Fig(1.6) Expérience de Compton

Compton trouve que le rayonnement diffusé possède une longueur d'onde λ' telle que :

$$\text{L'écart } \delta\lambda = \lambda' - \lambda > 0$$

$\delta\lambda$ ne dépend ni de λ ni de la nature du bloc de matière utilisé. $\delta\lambda$ dépend uniquement de l'angle θ

$$\delta\lambda = f(\theta) \quad (1.16)$$

Ce résultat contredit les prévisions classiques qui considèrent qu'il ne devrait pas y avoir de changement de longueur d'onde lors de la diffusion d'une onde électromagnétique par un électron.

1.4.2. Interprétation de Compton :

Compton interprète la diffusion avec changement de longueur d'onde comme une collision élastique entre le photon et l'électron. Comme l'énergie du photon incident est très grande

(Il s'agit d'un rayonnement X) on supposera que l'électron est au repos et on négligera son travail de sortie. Pour retrouver théoriquement la relation expérimentale (1.16), on écrira les équations de conservations de l'énergie et de la quantité de mouvement. Comme l'énergie du photon incident est grande, l'électron aura une grande vitesse après le choc et sera donc relativiste. Une particule est dite relativiste si sa vitesse atteint un dixième de celle de la lumière ($\frac{v}{c} \geq 0.1$). Dans ce cas les théorèmes généraux de la conservation de E et \vec{P} s'appliquent à condition de définir :

$$\text{L'énergie } E = mc^2 \quad (1.17)$$

Avec $m \neq m_0$.

m_0 est la masse au repos, m est la masse en mouvement,

$$\text{La quantité de mouvement } \vec{P} = m\vec{v} \quad (1.18)$$

$$\text{tel que } E \text{ et } \vec{P} \text{ soient reliés par : } E^2 - P^2c^2 = m_0^2c^4 \quad (1.20)$$

On attribue au photon une masse au repos nulle. La relation (1.20) nous permet de déduire sa quantité de mouvement. On trouve donc :

$$P = \frac{E}{c} \quad (1.21)$$

avec $E = h\nu$

En utilisant (1.17), (1.18) et (1.20) on déduit la relation entre les masses au repos et en mouvement:

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (1.22)$$

L'énergie cinétique de l'électron est la différence entre l'énergie totale en mouvement et celle au repos.

$$T = mc^2 - m_0c^2 \quad (1.23)$$

Le tableau suivant résume l'énergie et la quantité de mouvement de l'électron et du photon avant et après le choc :

		Avant le choc	Après le choc
Photon	Energie	$h\nu$	$h\nu'$
	Quantité de mouvement	$\frac{h\nu}{c}\vec{u}$	$\frac{h\nu'}{c}\vec{u}'$
Electron	Energie	m_0c^2	$mc^2 = \sqrt{P^2c^2 + (m_0c^2)^2}$
	Quantité de mouvement	$\vec{0}$	$\vec{P} = m\vec{v}$

Equations de conservation :

Conservation de l'énergie :

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + \sqrt{P^2c^2 + m_0^2c^4} \quad (1.24)$$

Conservation de la quantité de mouvement selon l'axe Ox :

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c}\cos\theta + P\cos\varphi \quad (1.25)$$

Conservation de la quantité de mouvement selon l'axe Oz :

$$0 = \frac{h\nu'}{c}\cos\theta - P\sin\varphi \quad (1.26)$$

Nous avons 3 équations et 4 inconnues : ν', P, θ, φ . Nous allons éliminer P et φ

En combinant (1.25) et (1.26) On élimine φ et on obtient :

$$P^2 = \frac{h^2}{c^2}((\nu - \nu'\cos\theta)^2 + \nu'^2\sin^2\theta) \quad (1.27)$$

L'équation (1.24) s'écrit :

$$P^2c^2 = (h(\nu - \nu') + m_0c^2)^2 - m_0^2c^4 \quad (1.28)$$

En combinant (1.27) et (1.28), on élimine P^2

$$h^2((\nu - \nu'\cos\theta)^2 + \nu'^2\sin^2\theta) = (h(\nu - \nu') + m_0c^2)^2 - m_0^2c^4$$

Et en simplifiant :

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta) \quad (1.29)$$

Qui est en parfait accord avec la loi expérimentale (1.16).

On pose : $\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$ (1.30)

λ_c s'appelle la longueur d'onde de Compton. Sa valeur numérique est $\lambda_c = 0.024 \text{ \AA}$

$\delta\lambda$ est une fonction croissante de θ car $\cos\theta$ est monotone sur l'intervalle $[0, \pi]$

Si $\theta = 0$, $\delta\lambda = 0$ cela veut dire qu'il n'y a pas de collision.

Si $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\delta\lambda = \lambda_c$

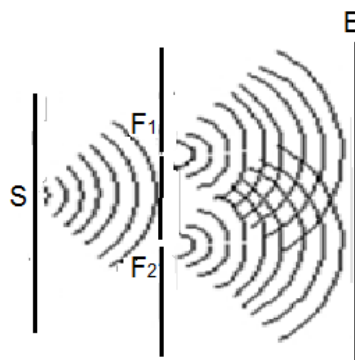
Si $\theta = \pi$, $\delta\lambda = 2\lambda_c$ c'est la rétrodiffusion. Dans ce cas l'énergie cinétique de l'électron après le choc est maximale.

1.5. Les fentes d'Young :

Dans les paragraphes précédents, nous avons vu qu'en considérant un aspect corpusculaire pour le rayonnement, on est arrivé à interpréter l'effet photoélectrique, l'effet Compton, et le comportement du corps noir. Devait-on alors rejeter la théorie classique ? Mais dans ce cas, comment expliquer les interférences lumineuses et la diffraction qui révèlent plutôt un aspect ondulatoire ? Il était donc impératif de trouver un moyen pour surmonter la contradiction apparente entre les deux descriptions.

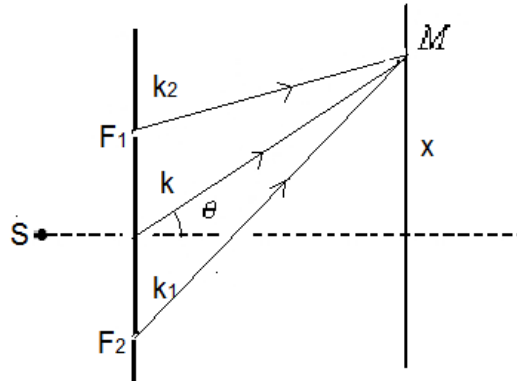
1.5.1. Expérience :

Une lumière monochromatique issue d'une source S passe par les fentes F_1 et F_2 . Les rayons issus de ces deux fentes tombent sur un écran d'observation situé à une distance D grande par rapport à la distance a entre F_1 et F_2 (Figure(1.7)).



Fig(1.7). Expérience des fentes d'Young

Dans le cas d'une onde lumineuse, les grandeurs qui oscillent sont les champs électrique et magnétique. Dans ce paragraphe, nous allons considérer comme fonction d'onde le champ électrique \vec{E} (Figure 1.7).



Fig(1.8) Calcul de l'intensité en un point M de l'écran

Le champ électrique s'écrit sous sa forme complexe :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$$

Les champs issus des deux fentes F_1 et F_2 s'écrivent :

$$\vec{E}_1 = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1)} \quad (1.31)$$

$$\vec{E}_2 = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)} \quad (1.32)$$

Et comme $D \gg a$, alors on fait l'approximation suivante :

$$\vec{k}_1 \approx \vec{k}_2 = \vec{k} \quad (1.33)$$

Le champ résultant au point M (voir fig(1.8)):

$$\begin{aligned} \vec{E}(M) &= \vec{E}_1(M) + \vec{E}_2(M) \\ &= \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \left(e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_2} \right) \end{aligned} \quad (1.34)$$

L'intensité lumineuse au point M est proportionnelle au carré du module du champ électrique en ce point,

$$I(M) \propto |\vec{E}(M)|^2 \quad (1.35)$$

$$\begin{aligned} |\vec{E}(M)|^2 &= \vec{E}(M) \vec{E}^*(M) \\ &= |E_0|^2 \left(e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} \right) \left(e^{-i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{-i\vec{k}\vec{r}_2} \right) = 2|\vec{E}_0|^2 \left(1 + \cos \vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right) \end{aligned} \quad (1.36)$$

On pose $\delta = \vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$

$$|\vec{E}(M)|^2 = 2|\vec{E}_0|^2 (1 + \cos \delta) \quad (1.37)$$

D'après la figure(1.8),

$$\delta = \vec{k} \cdot \vec{a} = ka \cos(\theta) \quad (1.38)$$

$$= ka \frac{x}{D}$$

$$\cos(\delta) = -1 \Leftrightarrow ka \frac{x}{D} = (2n + 1)\pi$$

$$\cos(\delta) = 1 \Leftrightarrow ka \frac{x}{D} = 2n\pi$$

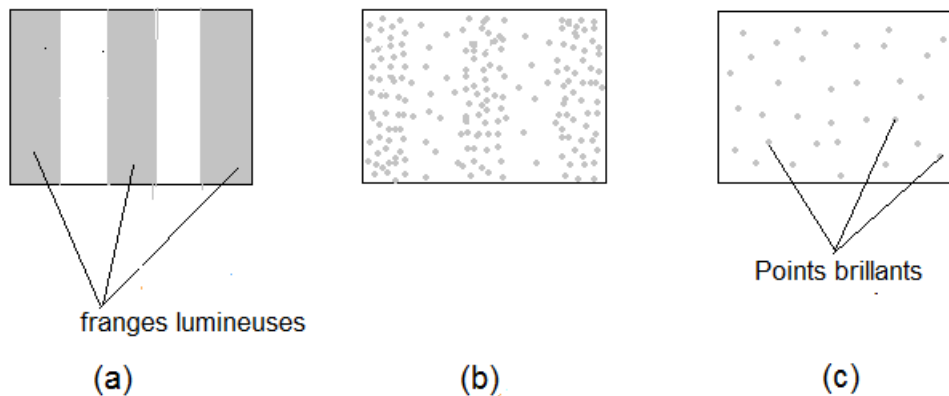
Un point situé à une distance x tel que $x = \frac{D}{ka} (2n + 1)\pi$ est obscur (eq(1.37)). On dit que les interférences sont destructives.

En revanche, un point situé à une distance x tel que $x = \frac{D}{ka} 2n\pi$ est extrêmement lumineux (Eq(1.37)). On dit que les interférences sont constructives.

Ainsi, la figure d'interférences s'explique en considérant que la lumière a un aspect ondulatoire. L'onde qui tombe en un point de l'écran est la superposition en ce point de l'onde issue de F_1 et de celle issue de F_2 .

1.5.2 Dualité onde-corpuscule :

Dans l'expérience des fentes d'Young, on décide de diminuer l'intensité de la lumière. On s'attend à ce que les franges de la figure((1.9),a) diminuent de façon continue jusqu'à disparaître. En fait, si l'intensité de la lumière diminue, on voit l'image d'interférences se transformer tel qu'il est indiqué sur la figure (fig(1.9),b) et lorsque l'intensité devient suffisamment faible, on voit sur la plaque des points brillants localisés qui remettent en évidence l'aspect corpusculaire de la lumière ! (fig(1.9),c) Si on augmente l'intensité, la figure d'interférence se redessine !(on retrouve l'image sur la figure(1.9),a)).



Fig(1.9) Evolution de la figure d'interférence en fonction de l'intensité de la lumière.

Cette expérience permet de déduire que la lumière se comporte comme un faisceau de corpuscules dans son interaction avec l'écran. Autrement dit, c'est un ensemble de photons qui arrivent sur l'écran en des points localisés. En augmentant l'intensité de la lumière, la figure d'interférences se forme petit à petit. Ceci veut dire que lorsque le nombre de photons qui arrivent sur l'écran augmente, ils ne tombent pas n'importe où, mais se distribuent selon une loi de probabilité qui correspond à la figure d'interférences. Les lieux des franges lumineuses (maximum d'intensité) sont les lieux où la probabilité de présence des photons sur l'écran est grande. Il se trouve que ce sont aussi les lieux où la grandeur du carré du module du champ électrique est grande et vice versa.

En 1924, Max Born a interprété $\vec{E}(\vec{r}, t)$ comme la fonction d'onde du photon. Cette fonction d'onde contient tous les informations sur ce photon. $|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$ représente la probabilité de présence du photon au point \vec{r} , à l'instant t .

On va conclure donc que la lumière se comporte à la fois comme une onde et un corpuscule. L'onde permet de calculer la densité de probabilité de présence du corpuscule en un point donné, en un temps donné. C'est ce qui caractérise 'un objet quantique'.

1.6 Stabilité de l'atome et spectres atomiques:

1.6.1 Modèle de Rutherford :

A la fin du XIX^e siècle, Rutherford avait imaginé un modèle planétaire pour l'atome dans lequel les électrons gravitent autour du noyau comme les planètes le font autour du soleil. Mais contrairement aux planètes, les électrons sont chargés. Or une charge électrique

accélérée émet un rayonnement électromagnétique. L'électron devrait donc perdre son énergie par rayonnement jusqu'à tomber sur le noyau.

Par ailleurs, d'après la mécanique classique, la fréquence du rayonnement émis devrait varier de façon continue avec le rayon de l'orbite lors de la chute de l'électron. On s'attend donc à observer un spectre continu. En réalité, on observe un spectre de raies.

La physique classique est donc incapable d'expliquer la stabilité des atomes, ni le spectre d'émission de ces atomes.

1.6.2 Modèle de Bohr :

Pour tenter d'expliquer la stabilité de l'atome ainsi que le spectre de raies, Bohr a posé les postulats suivants :

- 1) Les électrons ne peuvent occuper que des orbites dites « stationnaires » sur lesquels ils ne peuvent ni émettre ni absorber de l'énergie.
- 2) Les seules orbites stationnaires sont celles pour dans lesquelles le moment cinétique est quantifié. Autrement dit, celles qui vérifient :

$$mvr = n\hbar \quad (1.39)$$

$$\text{Avec : } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

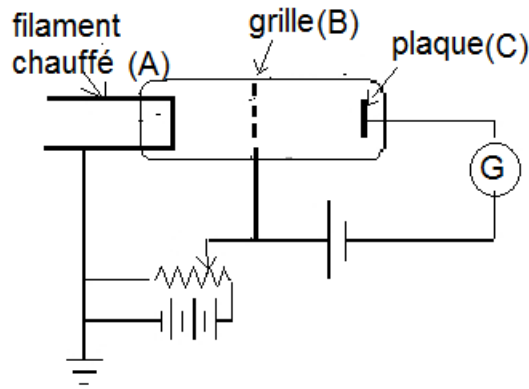
m est la masse de l'électron, v sa vitesse, r est le rayon de son orbite et n est un entier naturel.

- 3) L'émission (ou l'absorption) est déterminée uniquement par le passage de l'électron d'une orbite d'énergie E_n à une autre d'énergie plus petite (ou plus grande) E_m .

Ce modèle de l'atome proposé par Bohr est basé sur les lois de la mécanique classique auxquelles il a ajouté un principe de quantification. Il aboutit à la quantification des rayons et de l'énergie atomique. Il explique avec succès les spectres atomiques.

1.6.3 Expérience de Franck et Hertz :

Dans le paragraphe précédent, on a vu que Bohr avait aboutit au fait que les niveaux d'énergie atomique sont quantifiés. Nous allons voir que l'expérience de Franck et Hertz va confirmer cette idée.



Fig(1.10) Dispositif expérimental de Franck et Hertz

Franck et Hertz ont utilisé le dispositif représenté par la figure(1.10). La cathode A est un filament chauffé qui émet des électrons. L'anode B est une grille à larges mailles portée à un potentiel U_g positif qui permet d'accélérer les électrons. Une plaque C portée un potentiel U_p très légèrement inférieur à U_g . On a :

$$U_p = U_g - \varepsilon \quad (1.40)$$

Les électrons quittent le filament avec une vitesse initiale nulle. Ils traversent la grille avec une vitesse V_g . En utilisant la conservation de l'énergie mécanique on a :

$$E_{cA} + E_{pA} = E_{cB} + E_{pB}$$

$$(-e)U_A = \frac{1}{2}mV_g^2 + (-e)U_B$$

$$\frac{1}{2}mV_g^2 = e(U_B - U_A)$$

$$\frac{1}{2}mV_g^2 = eU_g \quad (1.41)$$

Ces électrons, s'ils conservent leur énergie, arrivent sur la plaque avec une vitesse V_p qu'on calcule de la même manière que précédemment :

$$E_{cB} + E_{pB} = E_{cC} + E_{pC}$$

$$\frac{1}{2}mV_g^2 + (-e)U_B = \frac{1}{2}mV_p^2 + (-e)U_C$$

$$\frac{1}{2}mV_p^2 = \frac{1}{2}mV_g^2 - e(U_B - U_C) \quad (1.42)$$

$$\text{Or, } U_B - U_C = U_B - U_A + U_A - U_C = U_g - U_p$$

$$U_B - U_C = \varepsilon \quad (1.43)$$

En combinant (1.41, 1.42, 1.43) on obtient :

$$\frac{1}{2} m V_p^2 = e V_g - e \varepsilon \quad (1.44)$$

V_p est la vitesse des électrons qui n'ont subi que des chocs élastiques avec les atomes du gaz. Ceux qui cèdent une partie de leur énergie aux atomes, ne parviennent pas jusqu'à la plaque. L'expérience consiste à mesurer le courant I recueilli par cette plaque en fonction de V_g .

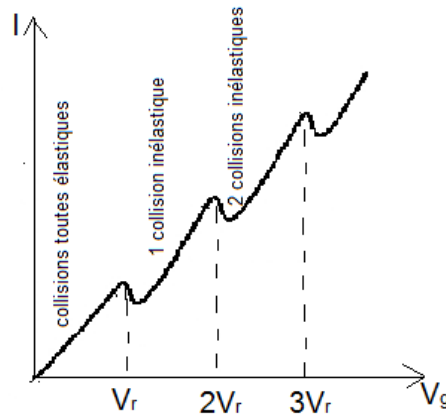


Fig.(1.11) Variation de l'intensité en fonction de la tension de la grille dans l'expérience de Franck et Hertz.

La figure(1.11) nous montre que si V_g atteint une certaine valeur caractéristique V_r (qu'on appelle potentiel de résonance) alors le courant chute brusquement ce qui indique que les électrons ont subi un choc inélastique et ne parviennent pas jusque la plaque. Il est important de remarquer qu'en dessous de V_r l'atome n'absorbe pas l'énergie de l'électron et par suite toutes les collisions sont élastiques. Si V_g atteint $2V_r$ on observe de nouveau une brusque diminution du courant. On explique cela par le fait que l'électron a subi deux collisions inélastiques successives. Le même phénomène a lieu pour $3V_r$, $4V_r$ et ainsi de suite. Ces résultats s'expliquent de la manière suivante: Considérons un atome dans son état fondamental E_0 . Si lors d'une collision l'énergie de l'électron lui permet d'accéder à son premier niveau excité E_1 , il l'absorbe (collision inélastique). Sinon, l'électron conserve son énergie (collision élastique) et contribue au courant.

En conclusion, les résultats de l'expérience de Franck et Hertz sont cohérents avec le postulat de Bohr qui considère que les niveaux d'énergie de l'atome sont discontinus. Néanmoins, le modèle de Bohr présente des faiblesses, et de plus, Bohr ne donne aucune justification à ce principe de quantification. Il y'a eu plusieurs tentatives d'expliquer les spectres atomiques par la mécanique classique mais elles ont échoué.

1.7 Aspect ondulatoire pour la matière :

1.7.1 Postulat de De Broglie :

Rappelons-nous que la lumière qu'on croyait tantôt ondulatoire, tantôt corpusculaire, s'est avérée possédant un double aspect.

En 1924, Louis De Broglie postule théoriquement l'existence d'un aspect ondulatoire pour la matière. Il associe à toute particule de quantité de mouvement \vec{p} , une onde de longueur d'onde λ telle que,

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.42)$$

En 1927, deux étudiants, Davisson et Germer ont confirmé expérimentalement cette hypothèse. Ils ont réalisé une diffraction des électrons par un cristal. Ils ont utilisé un faisceau d'électrons dont l'énergie est 54eV . Le paramètre du cristal est de $2,55\text{Å}$. Le premier maximum est observé dans un angle de 19° .

En admettant que l'électron est une onde, on calcule sa longueur d'onde en utilisant la loi de Bragg qui est vraie pour n'importe quelle onde :

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

On trouve alors :

$$\lambda = 2.2,55. \sin(19^\circ) = 1,67 \text{Å}.$$

On a pris $n = 1$ car il s'agit du premier maximum.

En utilisant la loi de De Broglie (1.42),

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{hc}{\sqrt{2mc^2E}} = \frac{12400}{\sqrt{0,511.54.10^3}} = 1,67 \text{Å}$$

Nous avons utilisé $hc = 12400 \text{ eV} \cdot \text{Å}$ et la masse au repos de l'électron $mc^2 = 0,511\text{MeV}$

On trouve la même valeur pour λ que celle calculée par la loi de Bragg. Ainsi, Davisson et Germer ont validé la loi de De Broglie.

On est amené à déduire que comme la lumière, la matière aussi a un double aspect. Elle est à la fois ondulatoire et corpusculaire.

1.7.2 Fonction d'onde pour une particule matérielle :

Comme pour la lumière, on associe une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ à toute particule matérielle. Cette fonction d'onde contient toutes les informations sur la particule.

$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ est la densité de probabilité de présence de la particule au point \vec{r} , à l'instant t .

On écrit :

$$\frac{dP}{dV} = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \Rightarrow dP = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV$$

dP représente la probabilité de trouver la particule dans un élément de volume dV .

Il est commode de normaliser la probabilité totale (on sait que la particule se trouve quelque part), et on écrit :

$$P = \int_{\text{tout l'espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \quad (1.43)$$

On dit que $\psi(\vec{r}, t)$ est de carré sommable.

Récapitulons : Nous avons vu que comme la lumière, la matière a un comportement qui paraît contradictoire. Il est parfois ondulatoire et parfois corpusculaire. La mécanique quantique a résolu cette contradiction apparente en expliquant qu'une particule n'est ni une onde ni un corpuscule, mais peut adopter l'un ou l'autre des comportements selon les conditions dans lesquelles elle se trouve. Si la longueur d'onde est négligeable par rapport aux dimensions mises en jeu, la particule se comporte comme un corpuscule et les lois de Newton décrivent parfaitement son comportement. Dans le cas contraire, comme par exemple dans l'expérience de Davisson et Germer où la longueur d'onde est du même ordre de grandeur que le paramètre du réseau, la particule adopte le comportement ondulatoire et la mécanique classique de Newton ne fonctionne plus.

1.7.3 Equation de Schrödinger :

Pour la lumière, nous avons une équation qui régit la propagation des ondes. Il s'agit de l'équation d'Alembert. Pour la matière, Schrödinger a postulé qu'une fonction d'onde associée à une particule matérielle $\psi(\vec{r}, t)$ doit obéir à l'équation d'onde suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (1.44)$$

Cette équation s'appelle équation de Schrödinger. C'est une équation linéaire aux dérivées partielles. L'opérateur qui apparaît dans le deuxième terme est l'hamiltonien d'une particule de masse m plongée dans un potentiel $V(\vec{r}, t)$. On écrit :

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \quad (1.45)$$

Au chapitre II, nous allons utiliser l'équation de Schrödinger pour comprendre le comportement d'une particule quantique dans des situations très simples.

1.8 Principes d'incertitude de Heisenberg :

Dans l'univers macroscopique, on peut toujours mesurer à la fois la position et l'impulsion d'une particule avec autant de précision que les instruments de mesure le permettent. C'est ce qui permet de déterminer sa trajectoire. En mécanique quantique ce n'est plus possible, et par conséquent la notion de trajectoire perd son sens physique. C'est le principe d'incertitude de Heisenberg qui s'énonce pour la variable x de la façon suivante:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.46)$$

Ici, Δx représente l'incertitude sur la mesure de x et Δp_x l'incertitude sur la mesure de p_x .

Ce principe s'énonce de la même manière pour les variables y et z .

Pour les systèmes classiques, les incertitudes dues au principe de Heisenberg sont insignifiantes devant les dimensions mises en jeu. Ce n'est pas le cas pour les systèmes quantiques.

Il en découle que si une particule quantique est confinée dans une région finie de l'espace, de largeur a par exemple, alors l'incertitude sur sa position sera au plus égale à a et donc :

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2a}$$

Cette particule ne peut donc jamais être au repos. Sa plus basse énergie n'est pas nulle et s'appelle 'énergie de localisation', ou 'énergie du point zéro'. Cette énergie du point zéro a de l'importance pour un système quantique, mais elle est insignifiante pour un système classique.

Il existe une autre relation d'incertitude entre le temps et l'énergie qui se formule de la façon suivante :

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.47)$$

Nous reviendrons sur cette relation au chapitre IV. En mécanique quantique les quantités x , p_x ou E sont mesurables alors que le temps est un paramètre (par exemple, on mesure x à l'instant t). Pour cela, cette relation d'incertitude s'interprète de la façon suivante :

ΔE est l'incertitude sur l'énergie d'un système et Δt est la durée de vie de ce système. Par exemple, si l'énergie d'un système est parfaitement définie ($\Delta E = 0$), alors sa durée de vie est infinie ($\Delta t = \infty$). On dit de ce système qu'il est stationnaire. Par contre, s'il a une durée de vie finie, comme c'est le cas pour un atome excité, alors son énergie est connue avec une incertitude égale à :

$$\Delta E = \frac{\hbar}{2\Delta t}$$

Cet atome revient spontanément à son état fondamental après un temps Δt . Il émet une raie qui a un élargissement inévitable dû à ΔE , qu'on appelle 'élargissement naturel'.

Exercices

Exercice1 :

Une cellule photoélectrique est soumise à une lumière constituée de 4 radiations de longueur d'onde : $\lambda_1=2480\text{\AA}$, $\lambda_2=5000\text{\AA}$, $\lambda_3=1240\text{\AA}$, $\lambda_4=6500\text{\AA}$. L'énergie de liaison des électrons de la photocathode est $W_0=4\text{eV}$.

1-Y'a-t-il effet photoélectrique ? Quelles sont les radiations qui le produisent ?

2-On filtre le rayonnement incident de manière à ne laisser passer que λ_1 .

a-Calculer la vitesse des électrons au niveau de la photocathode.

b-Le courant électrique mesuré est de $1,8\mu\text{A}$. Calculer le nombre de photons absorbés par la plaque durant une seconde.

Exercice2 :

Deux faisceaux ultraviolets de longueur d'onde $\lambda_1=280\text{nm}$ et $\lambda_2=490\text{nm}$ frappent une surface métallique. Ils produisent des photoélectrons avec des énergies maximales de 2.23eV et 0.33eV respectivement.

Calculer le travail d'extraction ainsi que la fréquence seuil du métal utilisé.

Exercice 3 :

Pour interpréter la diffusion du rayonnement électromagnétique par les électrons, on considère le photon comme une particule qui entre en choc élastique avec l'électron libre (ou très faiblement lié).

Soit un photon d'énergie $h\nu$ qui frappe un électron libre au repos.

1-Ecrire les équations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement.

2-Montrer que la longueur d'onde après le choc augmente de $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$

3-Calculer la variation de la longueur d'onde que subit un rayon X de longueur d'onde 0.3\AA au cours d'une diffusion d'un angle de 60° , ainsi que l'énergie cinétique de l'électron après diffusion.

Exercice4 :

Un photon de longueur d'onde $\lambda=0,5100\text{\AA}$ a subi deux diffusions consécutives par effet Compton selon les angles 30° et 60° .

1-Calculer les longueurs d'onde après chaque diffusion (λ_1 et λ_2).

2-Calculer l'énergie cinétique de l'électron dans chaque diffusion.

3-Quelle est l'énergie perdue par le photon après les deux diffusions.

Exercice 5 : 1-Rappeler les postulats de Bohr pour un atome hydrogénoïde.

2-Trouver l'expression du rayon de l'atome. En déduire la valeur numérique du rayon de la première orbite de Bohr a_0 .

3-Trouver l'expression de l'énergie totale de l'électron sur une orbite stationnaire. En déduire l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

4-Trouver l'expression de la constante de Rydberg.

5-Quelle est la longueur d'onde du photon émis quand un électron de l'atome de Bohr subit une transition de $n_1=5$ à $n_2=2$.

6-L'électron de l'atome d'hydrogène se trouvait dans un niveau d'énergie supérieur. En revenant vers le niveau d'énergie $n=3$, il émet un photon de longueur d'onde $\lambda = 10965\text{\AA}$. Dans quel niveau d'énergie se trouvait l'électron ?

7-Calculer la longueur d'onde de De Broglie de l'électron λ_n , $n = 1,2,3$ dans les trois premières orbites de l'atome d'hydrogène et montrer que la longueur d'une orbite atomique est un nombre entier de λ_n .

Exercice 6 :

1-Calculer la longueur d'onde de De Broglie pour :

a-Un proton dont l'énergie cinétique est de 70 MeV.

b-Un grain de poussière de masse $m=10^{-12}\text{g}$ propulsé à la vitesse de 0.1cm/s.

c-Une balle de 100g dont la vitesse est de 900m/s.

2-Déterminer la ddp qu'il faut appliquer pour accélérer un électron de sorte que sa longueur d'onde soit égale à 1Å.

Exercice 7 :

Estimer l'incertitude sur la position dans les cas suivants :

1-Un neutron dont la vitesse est de $5 \cdot 10^6\text{m/s}$.

2-Une petite bille de masse $m=2\text{g}$ dont la vitesse est de 5m/s.

3-Une personne de 50Kg se déplaçant à 2m/s.

Chapitre 2 Particule dans un potentiel stationnaire

2.1 Introduction :

Dans ce chapitre nous allons résoudre l'équation de Schrödinger dans des cas appelés stationnaires. Il s'agit de situations où le potentiel ne dépend pas explicitement du temps (La même expérience réalisée à des instants différents donnerait le même résultat). On verra que l'équation de Schrödinger prend une autre forme et sa solution est dite 'solution stationnaire'. De plus, on traitera des modèles généralement à une dimension (à l'exception de la boîte cubique) dans lesquels les difficultés purement mathématiques seront minimisées au maximum. Ces exemples, même très simples du point de vue mathématique nous permettront de comprendre le comportement d'une particule en mécanique quantique et de faire des comparaisons avec les prévisions de la mécanique classique.

2.2 Equation de Schrödinger indépendante du temps :

L'équation de Schrödinger dans le cas général a été introduite au chapitre précédent (eq(1.44)). On rappelle son expression :

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

On se propose de réécrire cette équation dans le cas stationnaire. C'est-à-dire dans le cas où :

$$V(r, t) = V(r)$$

Dans ce cas la fonction d'onde décrivant le système est le produit d'une fonction qui ne dépend que de r par une fonction qui ne dépend que de t . On écrit :

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

En insérant cette expression dans l'équation de Schrödinger on obtient :

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

Et puisque l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t}$ n'agit que sur $\chi(t)$, et le Laplacien n'agit que sur $\varphi(r)$

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

En divisant par $\varphi(r) \chi(t)$

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(r)} \Delta \varphi(r) + V(r)$$

On obtient une expression qui ne dépend que de t et une autre qui ne dépend que de r . Ces deux expressions sont égales quelles que soient les valeurs de r et de t . Ceci n'est possible que si elles sont toutes les deux égales à une même constante. On notera cette constante E . L'équation de Schrödinger nous donnera donc deux équations indépendantes:

$$i\hbar \frac{1}{\chi(t)} \frac{\partial}{\partial t} \chi(t) = E \quad (2.1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\varphi(r)} \Delta \varphi(r) + V(r) = E \quad (2.2)$$

La première est une équation différentielle à variables séparables qui s'intègre facilement. Sa solution est :

$$\chi(t) = A \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (2.3)$$

La deuxième devient :
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)\right)\varphi(r) = E\varphi(r) \quad (2.4)$$

Ou simplement : $H\varphi(r) = E\varphi(r)$

où $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r)$ s'appelle l'hamiltonien du système, et $\varphi(r)$ la solution stationnaire.

L'équation (2.4) s'écrit aussi :

$$\Delta \varphi(r) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(r))\varphi(r) = 0 \quad (2.5)$$

Cette équation s'appelle équation de Schrödinger indépendante du temps (ou équation de Schrödinger par abus de langage).

Si on connaît l'expression de $V(r)$, on peut déterminer $\varphi(r)$. La solution générale sera donc,

$$\psi(r, t) = \varphi(r) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Dans ce chapitre nous allons étudier des problèmes à une dimension et l'équation (2.5) devient :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\varphi(x) = 0 \quad (2.6)$$

2.3 Conditions de continuité aux interfaces:

On sait qu'en électromagnétisme, les champs électrique et magnétique satisfont à des conditions de continuité à l'interface entre deux milieux de propriétés électromagnétiques différentes. De la même manière, en mécanique quantique on impose les deux conditions suivantes :

Condition de continuité de la fonction d'onde : $\varphi(x)$ est partout continue.

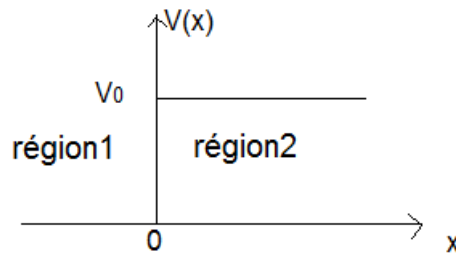
Condition de continuité de la dérivée de la fonction d'onde : $\frac{d}{dx}\varphi(x)$ est continue partout sauf aux points où le potentiel est infini.

2.4 Marche de potentiel :

Considérons une particule d'énergie E qui vient de la gauche vers la droite. Elle rencontre en $x = 0$ une marche de potentiel $V(x)$ (figure(2.1)), telle que :

$$V(x) = 0 \text{ pour } x < 0 \quad (\text{région1})$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } x \geq 0 \quad (\text{région2})$$



Fig(2.1) marche de potentiel

On écrit l'équation de Schrödinger indépendante du temps (eq(2.6)) :

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

Résolution dans la région1 :

Dans la région1 $V(x) = 0$

$$\text{On pose : } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.7)$$

$$\text{et on obtient, } \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + k_1^2\varphi_1(x) = 0 \quad (2.8)$$

Cette équation a pour solution :

$$\varphi_1(x) = A_1 \exp(ik_1x) + B_1 \exp(-ik_1x) \quad (2.9)$$

C'est la superposition de deux ondes, l'une de vecteur d'onde k_1 se propageant de la gauche vers la droite (onde incidente) et l'autre de vecteur d'onde $-k_1$ se propageant selon la direction opposée (onde réfléchie).

Résolution dans la région 2 :

Dans la région 2, $V(x) = V_0$. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \varphi_2(x) = 0 \quad (2.10)$$

Deux cas se présentent :

1^{er} cas : $E > V_0$

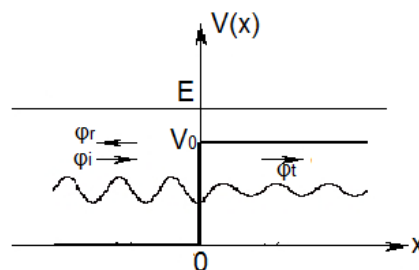
Dans ce cas, on pose $k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$ (2.11)

et on obtient : $\frac{d^2 \varphi_2(x)}{dx^2} + k_2^2 \varphi_2(x) = 0$ (2.12)

Dont la solution est :

$$\varphi_2(x) = A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x) \quad (2.13)$$

Par hypothèse, il n'y a pas d'onde venant de la droite ce qui impose $B_2 = 0$ et on reconnaît l'onde transmise (fig(2.2)) : $\varphi_2(x) = A_2 \exp(ik_2 x)$ (2.14)



Fig(2.2) Marche de potentiel ($E > V_0$)

On définit les coefficients de réflexion R et T :

$$R = \frac{\text{densité de courant réfléchi}}{\text{densité de courant incident}}$$

$$T = \frac{\text{densité de courant transmis}}{\text{densité de courant incident}}$$

En mécanique quantique, on montre que la densité de courant est donnée par:

$$J = \frac{\hbar}{2mi} (\varphi^* \nabla \varphi - \varphi \nabla \varphi^*) \quad (2.15)$$

Nous allons utiliser cette expression pour calculer les densités de courant dans les différentes zones, ce qui nous permettra de déduire les coefficients de réflexion et de transmission.

Dans la région1 on a :

$$J_1 = \frac{\hbar}{2mi} (\varphi_1^* \nabla \varphi_1 - \varphi_1 \nabla \varphi_1^*)$$

$$\begin{aligned} \varphi_1^* \nabla \varphi_1 &= (A_1^* \exp(-ik_1 x) + B_1^* \exp(ik_1 x)) \frac{d}{dx} (A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)) \\ &= ik_1 |A_1|^2 - ik_1 A_1^* B_1 \exp(-2ik_1 x) + ik_1 A_1 B_1^* \exp(2ik_1 x) - ik_1 |B_1|^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_1 \nabla \varphi_1^* &= (A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)) \frac{d}{dx} (A_1^* \exp(-ik_1 x) + B_1^* \exp(ik_1 x)) \\ &= -ik_1 |A_1|^2 + ik_1 A_1 B_1^* \exp(2ik_1 x) - ik_1 A_1^* B_1 \exp(-2ik_1 x) + ik_1 |B_1|^2 \end{aligned}$$

$$J_1 = \frac{k_1 \hbar}{m} (|A_1|^2 - |B_1|^2) \quad (2.16)$$

L' expression(2.16) montre que la densité de courant dans la zone 1 se compose de deux parties : une incidente et une autre réfléchie. Et par suite le coefficient de réflexion devient :

$$R = \frac{\frac{k_1 \hbar}{m} |A_1|^2}{\frac{k_1 \hbar}{m} |B_1|^2} = \frac{|A_1|^2}{|B_1|^2} \quad (2.17)$$

Dans la région2 la fonction d'onde est : $\varphi_2(x) = A_2 \exp(ik_2 x)$

La densité de courant est donc :

$$J_2 = \frac{\hbar k_2}{m} |A_2|^2 \quad (2.18)$$

$$\text{Et } T = \frac{k_2}{k_1} \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \quad (2.19)$$

Pour calculer R et T , il faut utiliser les conditions de continuité (ou conditions aux limites). Au point $x = 0$ on écrit donc :

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0)$$

$$\text{et } \varphi_1'(0) = \varphi_2'(0)$$

Ce qui donne :

$$A_1 + B_1 = A_2$$

et $ik_1A_1 - ik_1B_1 = ik_2A_2$

Et par suite :

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 \quad (2.20)$$

$$T = \left(\frac{2k_1}{k_1 + k_2}\right)^2 \frac{k_2}{k_1} \quad (2.21)$$

D'après l'équation (2.20), la mécanique quantique prévoit une possibilité de réflexion de la particule même lorsque l'énergie de cette particule est supérieure à la valeur du potentiel dans la région 2 (autrement dit, la valeur de l'énergie potentielle de la particule dans la zone 2). Ce résultat est contradictoire avec la mécanique classique. Par ailleurs on vérifie bien que $R + T = 1$ ce qui veut dire que la particule est soit réfléchi soit transmise.

2^{eme} cas : $E < V_0$:

On note dans ce cas $\varphi_3(x)$ la fonction d'onde qui décrit l'état de la particule dans la région 2. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} - \rho^2\varphi_3(x) = 0 \quad (2.22)$$

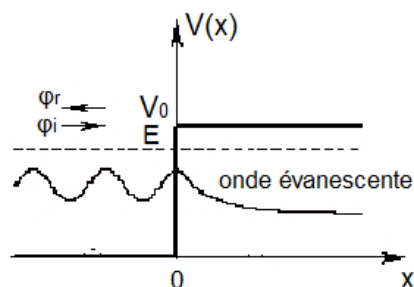
$$\text{Avec : } \rho^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

$$\text{Et sa solution est : } \varphi_3(x) = A_3 \exp(-\rho x) + B_3 \exp(\rho x) \quad (2.23)$$

Nous avons une particule qui se trouve dans une zone qui s'étend à l'infini. Or à l'infini, le terme « $\exp \rho x$ » devient infini, et la fonction n'est plus de carré sommable, ce qui est inacceptable physiquement. La constante B_3 est donc forcément nulle et la solution devient :

$$\varphi_3(x) = A_3 \exp(-\rho x)$$

Cette solution s'appelle 'onde évanescente' (voir figure (2.3)).



Fig(2.3) Marche de potentiel ($E < V_0$)

Calculons la densité de probabilité de présence de la particule dans la région 2.

$$\frac{dP(x)}{dx} = |\varphi_3(x)|^2 = |A_3|^2 \exp(-2\rho x) \quad (2.24)$$

La densité de probabilité de présence de la particule dans la région 2 est non nulle! Elle diminue jusqu'à devenir négligeable après une distance égale à $\frac{1}{\rho}$ qu'on appelle 'la portée de l'onde évanescente'. Encore une fois, les résultats obtenus par la mécanique quantique n'étaient pas prévus par la mécanique classique. La particule peut accéder à une région où le potentiel est supérieur à son énergie cinétique.

Le courant de probabilité dans la région 2 est donné par :

$$J_3 = \frac{\hbar}{2mi} (\varphi_3^* \nabla \varphi_3 - \varphi_3 \nabla \varphi_3^*)$$

$$J_3 = 0 \quad (2.25)$$

$$\text{d'où : } T = 0 \quad (2.26)$$

$$\text{et par suite } R = 1 \quad (2.27)$$

La réflexion est totale. Mais on avait montré que la densité probabilité de présence de la particule dans la région 2 est non nulle (eq(2.24)). Y'a-t-il une contradiction entre (eq(2.26)) et (eq(2.24)) ?

Pour répondre à cette question, on va calculer le rapport $\frac{B_1}{A_1}$. En utilisant les conditions de raccordement à la frontière entre les deux régions. On trouve :

$$A_1 + B_1 = A_3$$

$$ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = -\rho A_3$$

Les équations ci-dessus donnent :

$$\frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho} \quad (2.28)$$

L'expression (2.28) est le rapport de deux nombres complexes conjugués l'un de l'autre. En posant $\rho = Z \sin(\theta)$ et $k_1 = Z \cos(\theta)$, on obtient :

$$\frac{B_1}{A_1} = \exp(-2i\theta) \quad \Rightarrow \quad B_1 = A_1 \exp(-2i\theta) \quad (2.29)$$

L'expression (2.29) montre qu'il apparaît un retard de phase entre l'onde incidente et l'onde réfléchie. En effet, l'onde incidente pénètre à l'intérieur de la zone 2 ensuite elle rebrousse chemin ce qui explique le fait que $\rho(x) \neq 0$.

Dans la région2 il y'a deux courant. L'un positif de transmission et l'autre négatif de réflexion. Ces deux courants se compensent exactement, d'où $J_3 = 0$. Il n'y a donc pas de contradiction.

En conclusion, la mécanique quantique prévoit une pénétration de la particule dans la région2 dans le cas où $E < V_0$. Cependant, la réflexion est totale (puisque $R = 1$) mais elle se fait à l'intérieur de la Région2. Ce résultat n'était pas prévisible par la mécanique classique pour laquelle la région2 est strictement interdite.

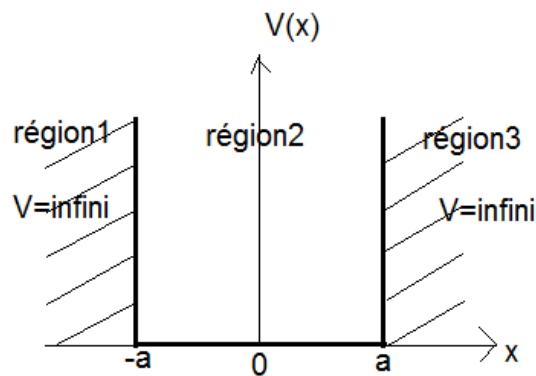
2.5 Puits de potentiel infini symétrique:

Soit une particule qui se trouve dans une région où le potentiel est défini par :

$$V(x) = 0 \quad \text{si} \quad -a < x < a$$

$$V(x) = \infty \quad \text{si} \quad x < -a \quad \text{ou} \quad x > a$$

L'espace se divise en trois régions (voir figure (2.4)).



Fig(2.4) Puits de potentiel infini symétrique

Dans la région1 et la région3, le potentiel est infini. Dans ce cas, la solution de l'équation de Schrödinger est nulle. En fait, la particule n'a aucune chance de se trouver dans une région où le potentiel est infini. On écrit :

$$\varphi_1(x) = \varphi_3(x) = 0 \quad (2.30)$$

Dans la région2, $V(x)$ est symétrique par rapport à l'origine ($x = 0$). Dans ce cas, la fonction d'onde $\varphi(x)$ qui décrit la particule est nécessairement paire ou impaire.

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (2.31)$$

Et en introduisant le vecteur d'onde k :

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Et les solutions de l'équation (2.31) sont :

$$\varphi_p(x) = A \cos(kx) \quad \text{pour les fonctions paires} \quad (2.32)$$

$$\varphi_i(x) = B \sin(kx) \quad \text{pour les fonctions impaires} \quad (2.33)$$

En utilisant (2.30), les conditions de continuité donnent :

$$\varphi(a) = \varphi(-a) = 0 \quad (2.31)$$

Ceci donne dans le cas des fonctions paires $\cos(k_p a) = 0 \Rightarrow k_p = (2n+1)\frac{\pi}{2a}$ d'où

$$E_p = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(2n+1)^2 \pi^2}{4a^2}$$

Qui s'écrit encore :

$$E_p = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{N^2 \pi^2}{4a^2} \quad \text{avec} \quad N \text{ impair} \quad (2.32)$$

Dans le cas des fonctions impaires, $\sin(k_i a) = 0 \Rightarrow k_i = \frac{n\pi}{a} = \frac{2n\pi}{2a}$ d'où $E_i = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(2n)^2 \pi^2}{4a^2}$

Qui s'écrit encore :

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{N^2 \pi^2}{4a^2} \quad \text{avec} \quad N \text{ pair} \quad (2.33)$$

L'énergie est donnée par la même expression dans le cas des fonctions paires et impaires (expressions (2.32) et (2.33)). On écrit alors :

$$E_N = \frac{N^2 \hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} N \text{ impair pour les fonctions paires} \\ N \text{ pair pour les fonctions impaires} \end{cases} \quad (2.34)$$

Pour calculer les constantes A et B on normalise la fonction d'onde. On écrit pour les fonctions paires par exemple :

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a |\varphi_p(x)|^2 dx = 1 &\Rightarrow |A|^2 \int_{-a}^a \cos^2 kx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_{-a}^a \frac{1 + \cos 2kx}{2} dx = 1 \\ &\Rightarrow |A|^2 \left(\int_{-a}^a \frac{1}{2} dx + \frac{1}{2} \int_{-a}^a \cos(2 \frac{N\pi}{2a} x) dx \right) = 1 \end{aligned}$$

La deuxième intégrale s'annule et on obtient :

$$A = \frac{1}{\sqrt{a}}$$

Le même calcul donne le même résultat pour les fonctions impaires.

L'expression générale des fonctions d'ondes s'écrit :

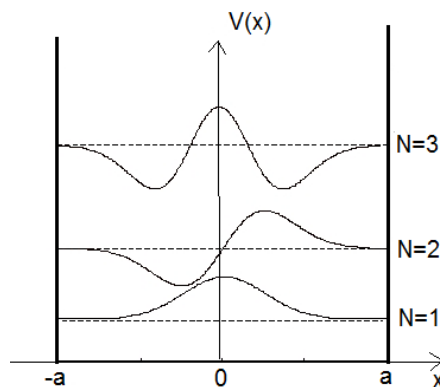
Pour les fonctions paires :

$$\varphi_N(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{N\pi}{2a}\right)x \quad \text{avec } N \text{ impair} \quad (2.37)$$

Pour les fonctions impaires :

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{N\pi}{2a}\right)x \quad \text{avec } N \text{ pair} \quad (2.38)$$

Dans la figure (2.5) on représente les trois premières fonctions d'onde.



Fig(2.5) Représentation des trois premières fonctions d'onde

Remarque:

On remarque que l'énergie est quantifiée contrairement à ce que prévoit la mécanique classique.

De plus, N est forcément non nul, sinon on aurait une fonction d'onde nulle partout et par conséquent une densité de probabilité de présence nulle partout ce qui est contradictoire avec notre hypothèse (particule enfermée dans un puits de potentiel). Il en résulte que l'énergie la plus basse (niveau fondamental) correspond à $N = 1$ et elle n'est pas nulle! Ce résultat n'était pas prévisible par la mécanique classique. De toutes les façons, on sait qu'une énergie nulle n'aurait pas été possible car elle serait en contradiction avec le principe d'incertitude de Heisenberg.

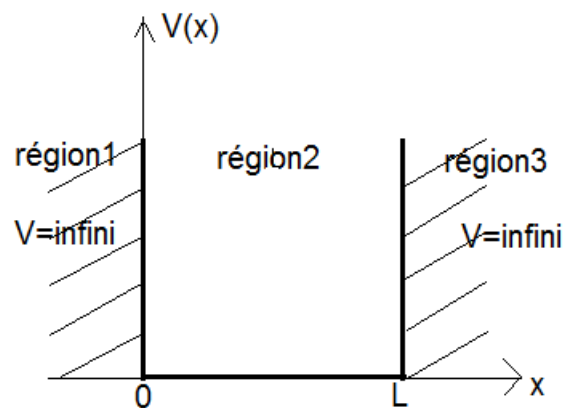
Quand on cherche à localiser la particule (en faisant diminuer la valeur de « a »), l'énergie cinétique prend une valeur minimale qu'on appelle 'énergie de localisation'. Cette énergie minimale (dite de localisation) est d'autant plus importante que la valeur de a diminue.

On remarque la présence de nœuds qui sont des points où la fonction d'onde s'annule. Ce sont donc des points où la particule n'a aucune chance de s'y trouver. Ceci non plus n'est pas prévisible par la mécanique classique qui considère que la particule peut accéder à tous les points entre $-a$ et a .

2.6 Puits de potentiel infini non symétrique:

Le potentiel est défini de la manière suivante (figure (2.6)) :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < L \\ \infty & \text{si } x < 0 \text{ ou si } x > L \end{cases}$$



Fig(2.6) Puits de potentiel infini non symétrique

Dans la région 2, l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \varphi(x) = 0 \quad (2.39)$$

Et sa solution :

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (2.40)$$

Les conditions de continuité donnent :

$$\varphi(0) = 0 \quad (2.41)$$

$$\varphi(L) = 0 \quad (2.42)$$

La première condition (2.41) impose : $B = -A$

D'où :

$$\varphi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin(kx) = C \sin(kx) \quad (2.43)$$

Et la deuxième condition nous impose la quantification du vecteur d'onde k :

$$C \sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = n\pi \Rightarrow k_n = \frac{n\pi}{L} \quad (2.44)$$

La condition de normalisation nous donne :

$$C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Ce qui donne finalement :

$$\varphi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (2.45)$$

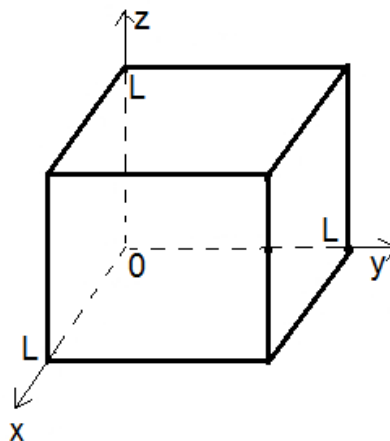
La quantification du vecteur d'onde implique la quantification de l'énergie, ce qui donne :

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (2.46)$$

2.7 Particule libre dans une boîte cubique :

Considérons une particule libre de masse m , enfermée dans une boîte cubique de côté L (Figure (2.7)). Le potentiel est défini de la manière suivante :

$$\begin{cases} V = 0 & \text{si } 0 < x, y, z < L \\ V = \infty & \text{ailleurs} \end{cases}$$



Fig(2.7) Boite de potentiel cubique

La fonction d'onde décrivant cette particule s'écrit:

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$$

Ecrivons l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2\psi(x, y, z)}{dx^2} + \frac{d^2\psi(x, y, z)}{dy^2} + \frac{d^2\psi(x, y, z)}{dz^2} \right) = E\psi(x, y, z)$$

Qui s'écrit aussi :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi_y(y)\psi_z(z) \frac{d^2\psi_x(x)}{dx^2} + \psi_x(x)\psi_z(z) \frac{d^2\psi_y(y)}{dy^2} + \psi_x(x)\psi_y(y) \frac{d^2\psi_z(z)}{dz^2} \right) = E\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$$

En divisant par $\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z)$, on obtient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\psi_x(x)} \frac{d^2\psi_x(x)}{dx^2} + \frac{1}{\psi_y(y)} \frac{d^2\psi_y(y)}{dy^2} + \frac{1}{\psi_z(z)} \frac{d^2\psi_z(z)}{dz^2} \right) = E$$

On obtient la somme de trois parties, l'une ne dépend que de x , l'autre que de y et la dernière que de z . Cette somme est constante quelles que soient x , y et z . La seule possibilité est que chaque partie soit elle-même constante. On écrit alors :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\psi_x(x)} \frac{d^2\psi_x(x)}{dx^2} \right) = E_x \quad (2.47)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\psi_y(y)} \frac{d^2\psi_y(y)}{dy^2} \right) = E_y \quad (2.48)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{\psi_z(z)} \frac{d^2\psi_z(z)}{dz^2} \right) = E_z \quad (2.49)$$

Tel que :

$$E = E_x + E_y + E_z \quad (2.50)$$

Cette procédure s'appelle la séparation de variables. Elle nous a permis de ramener le problème initial qui est à trois dimensions à trois problèmes distincts chacun étant à une dimension. Les équations (2.47), (2.48) et (2.49) sont identiques, et chacune d'elles est analogue à celle d'une particule dans un puits infini que nous avons résolue au paragraphe précédent (équation (2.39)). En utilisant les résultats obtenus précédemment (2.45) et (2.46) on écrit :

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (2.50)$$

Et :

$$\psi(x, y, z) = \left(\frac{2}{L} \right)^{3/2} \sin \frac{n_x \pi}{L} x \sin \frac{n_y \pi}{L} y \sin \frac{n_z \pi}{L} z \quad (2.51)$$

Dégénérescence de l'énergie :

A une dimension, l'énergie d'un état et la fonction d'onde associée sont caractérisées par un seul nombre quantique n . Donc à chaque niveau d'énergie correspond un seul état. Dans ce cas on dit que l'énergie est non dégénérée. A trois dimensions, ce n'est plus pareil. il faut trois nombres quantiques n_x, n_y, n_z pour repérer un état. Par conséquent, certains niveaux d'énergie sont dégénérés.

Ainsi, le niveau fondamental E_1 est obtenu pour $n_x = n_y = n_z = 1$. On obtient donc :

$$E_1 = E(1,1,1) = \frac{3\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \text{ Le niveau fondamental est non dégénéré}$$

De même :

$$E_2 = E(2,1,1) = E(1,2,1) = E(1,1,2) = \frac{6\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad E_2 \text{ est dégénéré trois fois.}$$

$$E_3 = E(2,2,1) = E(2,1,2) = E(1,2,2) = \frac{9\pi^2\hbar^2}{2mL^2}, \quad E_3 \text{ est dégénéré trois fois.}$$

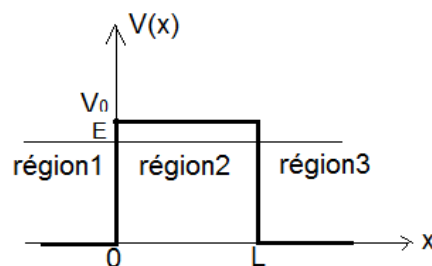
$$E_4 = E(2,2,2) = \frac{12\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \quad E_4 \text{ est non dégénéré.}$$

Et ainsi de suite....

2.8 Barrière de potentiel, effet tunnel :

Lorsque nous avons étudié la marche de potentiel, nous avons montré que la mécanique quantique prévoit une pénétration de la particule dans une zone où le potentiel est supérieur à son énergie. Mais sa densité de probabilité de présence diminue jusqu'à devenir négligeable. Dans ce paragraphe, nous allons voir ce qui se passe dans le cas d'une barrière de potentiel de dimension finie L définie par (figure (2.8)) :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } 0 \leq x \leq L \\ 0 & \text{si } x > L \end{cases}$$



Fig(2.8) Barrière de potentiel

Nous allons considérer le cas $E < V_0$. La mécanique classique prévoit une réflexion totale de la particule en $x = 0$.

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x)) = 0 \quad (2.52)$$

La solution de cette équation dans les trois zones est :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad (2.53)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho x} + B_2 e^{-\rho x} \quad (2.54)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ikx} \quad (2.55)$$

Avec : $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

Et $\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

Les équations de continuité aux points $x = 0$ et $x = a$ donnent :

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (2.56)$$

$$\varphi_1'(0) = \varphi_2'(0) \Rightarrow ikA_1 - ikB_1 = \rho A_2 - \rho B_2 \quad (2.57)$$

$$\varphi_2(a) = \varphi_3(a) \Rightarrow A_2 e^{\rho a} + B_2 e^{-\rho a} = A_3 e^{ika} \quad (2.58)$$

$$\varphi_2'(a) = \varphi_3'(a) \Rightarrow \rho A_2 e^{\rho a} - \rho B_2 e^{-\rho a} = ikA_3 e^{ika} \quad (2.59)$$

Le coefficient de transmission à travers la barrière est donné par :

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2$$

De (2.56) et (2.57) on élimine B_1 , ce qui donne :

$$2A_1 ik_1 = A_2(\rho + ik) - B_2(\rho - ik) \quad (2.60)$$

De (2.58) et (2.59), on tire A_2 et B_2 :

$$A_2 = \frac{A_3(\rho + ik)}{2\rho e^{\rho a}} e^{ika}$$

$$B_2 = \frac{A_3(\rho - ik)}{2\rho e^{-\rho a}} e^{ika}$$

On remplace A_2 et B_2 dans (2.60) :

$$2ik_1 A_1 = \frac{A_3}{2\rho} \left(\frac{(\rho + ik)^2}{e^{\rho a}} - \frac{(\rho - ik)^2}{e^{-\rho a}} \right) e^{ika}$$

$$= \frac{A_3}{2\rho} \left((\rho^2 - k^2) (-2sh(\rho a) + 2i\rho k (2ch(\rho a))) \right) e^{ika}$$

Et en élevant au carré la norme du rapport de A_3 par A_1 :

$$\left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{16\rho^2 k^2}{4(\rho^2 - k^2)^2 sh^2 \rho a + 16\rho^2 k^2 ch^2(\rho a)}$$

En remplaçant ρ^2 et k^2 par leur expression, et en utilisant la relation : $ch^2 x - sh^2 x = 1$

On obtient l'expression du facteur de transmission en fonction de E et de V_0 :

$$T = \frac{4 \frac{\rho^2}{k^2}}{\left(\frac{\rho^2}{k^2} + 1 \right)^2 sh^2(\rho a) + 4 \frac{\rho^2}{k^2}} = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} sh^2(\rho a)}$$

Ainsi, il apparait une probabilité de transmission non nulle à travers la barrière lorsque $E < V_0$. L'onde transmise est le prolongement de l'onde évanescente. Ce phénomène s'appelle « effet tunnel ». Il a été observé expérimentalement et ne peut d'aucune manière s'expliquer par la mécanique classique.

Exercices

Exercice1 :

On considère une particule en mouvement de masse m et d'énergie E dans un potentiel $V(x)$ défini comme suit :

$$V(x) = 0 \text{ pour } x \leq 0$$

$$V(x) = V_0 \text{ pour } x > 0$$

- 1- Ecrire et résoudre l'équation de Schrödinger dans la région 1.
- 2- Cas où $E > V_0$:
 - a- Ecrire et résoudre l'équation de Schrödinger dans la région 2.
 - b- Déterminer le coefficient de réflexion R et de transmission T et vérifier que $R+T=1$.
 - c- Exprimer R en fonction de E et V_0 .
 - d- Calculer R pour $E = \frac{3}{2} V_0$, $E = 5 V_0$, et $E = 100 V_0$. Quelle remarque peut-on faire?
- 3- Cas où $E < V_0$:
 - a- Calculer le coefficient de réflexion R . Déduire le coefficient de transmission T .
 - b- Calculer la probabilité d'existence de la particule dans la région $x > 0$. Le résultat obtenu est-il en contradiction avec la question 3 ? Expliquer.
 - c- Considérons un électron d'énergie 1eV rencontrant une barrière dont $V_0 = 2\text{eV}$. Calculer dans ce cas la portée de l'onde évanescence (c-à-d le facteur $1/\rho$ avec

$$\rho = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \text{). Refaire le calcul dans le cas d'un proton. Conclusion.}$$

Exercice2 :

Une particule se déplace suivant l'axe des x dans un puits de potentiel symétrique infini défini par :

$$V(x) = 0 \text{ pour } -a \leq x \leq a \text{ et } V(x) = \infty \text{ pour } |x| > a$$

Où a est une longueur constante.

1-En étudiant l'équation de Schrödinger, montrer que les fonctions d'onde décrivant les états possibles de cette particule sont :

$$\text{Pour } |x| > a, \psi_N(x) = 0$$

$$\text{Pour } |x| \leq a, \psi_N(x) = A \cos\left(\frac{N\pi x}{2a}\right) \text{ si } N \text{ est impair}$$

$$\psi_N(x) = B \sin\left(\frac{N\pi x}{2a}\right) \text{ si } N \text{ est pair}$$

2-Quand la particule est dans l'état décrit par la fonction d'onde ψ_2 son énergie est égale à 4eV.

- a- Quelle est l'énergie en eV correspondant à l'état décrit par ψ_3 ?
- b- Quelle est l'énergie en eV, la plus basse possible de cette particule ?
- c- Déterminer la longueur a en supposant que la particule est un électron.
- d- Donner l'allure des trois premières fonctions d'onde.

Chapitre 3 Outils mathématiques de la mécanique quantique

Dans ce chapitre nous allons étudier les propriétés mathématiques de l'espace des fonctions d'onde. Le formalisme sera simplifié au maximum, au détriment de la rigueur mathématique. Nous allons nous limiter à un espace à une dimension. Les résultats se généraliseront facilement à trois dimensions.

3.1 Espace des fonctions d'onde d'une particule :

3.1.1 Définition :

C'est l'ensemble des fonctions qui sont de carré sommable, autrement dit, celles pour qui l'intégrale $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx$ converge, et qui en plus sont partout définies, continues et infiniment dérivables. Cet ensemble est noté F . C'est un espace vectoriel.

On définit le produit scalaire dans F de ψ par φ par :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(x)\psi(x)dx \quad (3.1)$$

(φ, ψ) est un nombre complexe.

On montre facilement les relations suivantes :

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^* \quad (3.2)$$

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2) \quad (3.3)$$

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1(\varphi_1, \psi) + \lambda_2(\varphi_2, \psi) \quad (3.4)$$

3.1.2 Bases orthonormées dans F :

Soit un ensemble de fonctions $\{U_i(x)\} \in F$. Cet ensemble forme une base si et seulement si les relations suivantes sont satisfaites :

$$\text{La relation d'orthonormalisation : } (U_i, U_j) = \int U_i^*(x)U_j(x)dx = \delta_{ij} \quad (3.5)$$

$$\text{La relation de fermeture : } \forall \psi(x) \in F, \quad \psi(x) = \sum_i c_i U_i(x) \quad (3.6)$$

c_i sont les composantes de $\psi(x)$ sur $U_i(x)$. On montre que :

$$c_i = (U_i, \psi) \quad (3.7)$$

En effet,

$$\psi(x) = \sum_i c_i U_i(x) \Rightarrow U_j^*(x)\psi(x) = \sum_i c_i U_j^*(x)U_i(x)$$

$$\Rightarrow \int U_j^*(x)\psi(x)dx = \sum_i c_i \int U_j^*(x)U_i(x)dx = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

$$\Rightarrow (U_j, \psi) = c_j$$

3.1.3 Produit scalaire :

Soient deux fonctions d'onde : $\varphi(x) = \sum_i b_i U_i(x)$ et $\psi(x) = \sum_i c_i U_i(x)$. En utilisant les relations (3.1), (3.5) et (3.6) on a :

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi) &= \int \varphi^*(x)\psi(x)dx \\ &= \int \sum_i b_i^* U_i^*(x) \sum_j c_j U_j(x) dx \\ &= \sum_i \sum_j b_i^* c_j \int U_i^*(x)U_j(x) dx = \sum_i \sum_j b_i^* c_j \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i \end{aligned} \quad (3.8)$$

En particulier :

$$(\varphi, \varphi) = \sum_i |c_i|^2 \quad (3.9)$$

3.1.4 Fonction de Dirac :

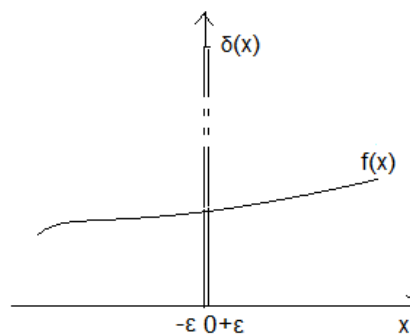
Elle peut être définie de la manière suivante :

$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x = 0 \\ 0 & \text{si } x \neq 0 \end{cases}$$

$$\text{Avec : } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (3.10)$$

On montre la propriété suivante de la fonction de Dirac (voir figure (3.1)):

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



Fig(3.1)illustration d'une propriété de la fonction $\delta(x)$

Plus généralement, on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \quad (3.11)$$

On veut obtenir une autre expression de la relation de fermeture (qui ne dépend que des $\{U_i(x)\}$). En effet, pour que les $\{U_i(x)\}$ forment une base dans F il faut que :

$$\begin{aligned} \forall \psi(x) \in F, \quad \psi(x) &= \sum_i c_i U_i(x) = \sum_i (U_i, \psi) U_i(x) \\ &= \sum_i \int dx' U_i^*(x') \psi(x') U_i(x) \\ &= \int \sum_i U_i^*(x') U_i(x) \psi(x') dx' \end{aligned}$$

Cette relation n'est satisfaite que si :

$$\sum_i U_i^*(x') U_i(x) = \delta(x - x'). \quad (3.12)$$

On retiendra cette expression pour la relation de fermeture.

3.1.5 Bases qui n'appartiennent pas à F :

3.1.5.1 Ondes planes :

On rappelle qu'une fonction périodique $f(x)$ se développe en série de fourrier :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (a_n \sin k_n x + b_n \cos k_n x) \quad a_n \text{ et } b_n \text{ sont des réels.}$$

Elle peut aussi se développer en série de fourrier complexe :

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} c_n \exp(ik_n x), \quad c_n \text{ sont des complexes}$$

Il est possible de généraliser ce développement à une fonction non périodique ; on obtient l'intégrale de fourrier (ou la transformée de fourrier):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \exp(ikx) dk$$

En mécanique quantique on utilise l'impulsion p au lieu de k . En utilisant la relation $p = \hbar k$, une fonction d'onde peut s'écrire :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \frac{dp}{\hbar}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(k)}{\sqrt{\hbar}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

On pose : $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$ (3.14)

$v_p(x)$ s'appelle onde plane. Elle n'appartient pas à F .

Soit $\{v_p(x)\}$, p variant de $-\infty$ à $+\infty$ l'ensemble de toutes les ondes planes. Toute fonction d'onde qui appartient à F peut se développer d'une manière unique sur ces ondes planes. On écrit alors :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) v_p(x) dp \quad (3.15)$$

$\bar{\psi}(p)$ est la composante de $\psi(x)$ sur les $v_p(x)$ et en utilisant la relation (3.7), on écrit :

$$\bar{\psi}(p) = (v_p, \psi) \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned}
 \bar{\psi}(p) &= \int v_p^*(x) \psi(x) dx \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \psi(x) dx \quad (3.17)
 \end{aligned}$$

On retrouve la transformée inverse de Fourier.

En calculant le carré de la norme de ψ de deux manières différentes, on trouve :

$$(\psi, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\bar{\psi}(p)|^2 dp \quad (3.18)$$

On retrouve l'égalité de Parseval.

En utilisant la relation satisfaite par la fonction de Dirac :

$$\delta(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(iku) dk \quad (3.19)$$

On peut vérifier que les ondes planes vérifient la relation d'orthogonalité et de fermeture.

$$\int v_{p'}^*(x) v_p(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int \exp\left(i \frac{x}{\hbar} (p - p')\right) d\left(\frac{x}{\hbar}\right) = \delta(p - p')$$

$$\int v_p^*(x')v_p(x)dp = \frac{1}{2\pi} \int \exp(i \frac{p}{\hbar}(x-x'))d\left(\frac{p}{\hbar}\right) = \delta(x-x') \quad (3.20)$$

3.1.5.2 Fonction Delta :

On pose :

$$\zeta_{x_0}(x) = \delta(x-x_0) \quad (3.21)$$

$\{\zeta_{x_0}(x)\}$ représente l'ensemble des fonctions Delta centrées aux points d'abscisse x_0 .

$$\forall \psi(x) \in F, \quad \psi(x) = \int \psi(x_0)\delta(x-x_0)dx_0 \quad (3.22)$$

Comme pour les ondes planes, l'ensemble $\{\zeta_{x_0}(x)\}$ forme donc une base continue sur laquelle peut se développer toute fonction d'onde $\psi(x)$

$\psi(x_0)$ est la composante de ψ sur ζ_{x_0}

$$\psi(x_0) = (\zeta_{x_0}, \psi) \quad (3.23)$$

3.2 Espace des états. Notation de Dirac :

3.2.1 Kets et bras :

On associe à chaque fonction d'onde $\psi(x) \in F$, un vecteur appelé ket, noté $|\psi\rangle$. Ce vecteur est indépendant du choix de la base (comme un vecteur en géométrie euclidienne). L'ensemble des kets constitue un espace vectoriel noté \mathcal{E} .

$$\psi(x) \in F \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

On associe à une base $\{U_i(x)\} \in F$, une base $\{|U_i\rangle\} \in \mathcal{E}$ appelée représentation dans \mathcal{E} .

Un ket est représenté par un vecteur 'colonne'.

Par exemple, soit un ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, dont l'espace est à deux dimensions et qui s'exprime en fonction des vecteurs de base de la manière suivante : $|\psi\rangle = c_1|U_1\rangle + c_2|U_2\rangle$, alors on écrit :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

A tout ket $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, on associe un objet mathématique appelé bra et noté $\langle\psi|$ tel que $\langle\psi|\varphi\rangle = (|\psi\rangle, |\varphi\rangle)$ c'est-à-dire le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ par $|\psi\rangle$.

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*(x)\varphi(x)dx \quad (3.24)$$

L'espace des bras est appelé espace dual de \mathcal{E} . Il est noté \mathcal{E}^* .

La notation $\langle\psi|\varphi\rangle$ pour le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ par $|\psi\rangle$ est appelée notation de Dirac.

Un bra est représenté par un vecteur 'ligne'.

Au ket $|\psi\rangle = c_1|u_1\rangle + c_2|u_2\rangle$ de l'exemple précédent, on associe le bra

$\langle\psi| = c_1^*\langle u_1| + c_2^*\langle u_2|$ et on écrit :

$$\langle\psi| = (c_1^* \quad c_2^*)$$

3.2.2 Relations caractéristiques d'une base orthonormée :

Les deux relations caractéristiques d'une base orthonormée sont :

Relation d'orthonormalisation :

Pour une base discrète : $(u_i, u_j) = \delta_{ij} \rightarrow \langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$ (3.25)

pour les bases continues : $(w_\alpha, w_\beta) = \delta(\alpha - \beta) \rightarrow \langle w_\alpha | w_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)$ (3.26)

Relation de fermeture :

Pour les bases discrètes : $\sum_i u_i^*(x)u_i(x') = \delta(x' - x) \rightarrow \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = I_d$ (3.27)

Pour les bases continues. $\int w_\alpha(x)w_\alpha(x')d\alpha = \delta(x - x') \rightarrow \int |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|d\alpha = I_d$ (3.28)

Où I_d représente l'opérateur identité.

3.2.3 Quelques propriétés :

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* \quad (3.29)$$

$$\langle\psi|\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2\rangle = \lambda_1\langle\psi|\varphi_1\rangle + \lambda_2\langle\psi|\varphi_2\rangle \quad (3.30)$$

$$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2|\psi\rangle \quad (3.31)$$

3.2.4 Opérateurs linéaires :

3.2.4.1 Définition :

Soit $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$. Si un objet A associe au ket $|\psi\rangle$, un ket $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ tel que $|\psi'\rangle \in \mathcal{E}$ et vérifie la relation :

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1A|\psi_1\rangle + \lambda_2A|\psi_2\rangle \quad (3.32)$$

Alors A est un opérateur linéaire.

Dans l'espace des états, A est représenté par une matrice. Ses éléments matriciels sont donnés par :

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

3.2.4.2 Commutateur de deux opérateurs :

On appelle commutateur de deux opérateurs A et B , l'opérateur noté $[A, B]$ et définit par :

$$[A, B] = AB - BA \quad (3.33)$$

Remarque :

Pour les kets, bras et opérateurs, il faut respecter l'ordre dans l'écriture.

Exemples :

$$AB \neq BA$$

$$\langle \psi | \varphi \rangle \neq | \varphi \rangle \langle \psi |$$

On ne peut changer la place que des nombres complexes :

Exemples :

$$|\psi\rangle \lambda = \lambda |\psi\rangle$$

$$A \lambda |\psi\rangle = \lambda A |\psi\rangle$$

$$\langle \varphi | \lambda |\psi\rangle = \lambda \langle \varphi | \psi \rangle$$

3.2.4.3 Projecteur sur un ket normé :

Soit un ket normé $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$, et soit l'opérateur défini par :

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \quad (3.34)$$

En appliquant P_ψ sur un ket $|\varphi\rangle$ on trouve,

$$\begin{aligned} P_\psi |\varphi\rangle &= |\psi\rangle \langle \psi | \varphi \rangle \\ &= \langle \psi | \varphi \rangle |\psi\rangle \\ &= \lambda |\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.35)$$

λ est le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ par $|\psi\rangle$. P_ψ est le projecteur orthogonal sur le ket $|\psi\rangle$. On peut vérifier que :

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (\text{puisque } |\psi\rangle \text{ est normé})$$

$$P_\psi^2 = P_\psi \quad (3.36)$$

Exemple :

Soit un système physique dont l'espace des états est à deux dimensions. $\{|u_i\rangle\}, i = 1,2$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle un ket $|\psi\rangle$ a la représentation suivante :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Ecrire le projecteur sur $|\psi\rangle$ et vérifier que $P_\psi^2 = P_\psi$

On commence par écrire le bra associé :

$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

$$P_\psi^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} = P_\psi$$

3.2.4.4 Projecteur sur un sous espace vectoriel :

Soit ε_q un sous espace vectoriel à q dimensions et $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \dots, |\varphi_q\rangle\}$ une base dans ce sous espace. On appelle le projecteur sur le sous espace ε_q l'opérateur noté P_q , défini par :

$$P_q = \sum_{i=1}^q |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \quad (3.37)$$

3.2.4.5 Opérateur adjoint :

Soit A un opérateur linéaire qui transforme un ket $|\psi\rangle$ en un ket $|\psi'\rangle$. L'opérateur adjoint de A transforme le bra $\langle\psi|$, en $\langle\psi'|$. On écrit :

$$A: |\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$A^+ : \langle \psi | \rightarrow \langle \psi | = \langle \psi | A^+$$

Remarque : $|A\psi\rangle = A|\psi\rangle$ mais $\langle A\psi| = \langle \psi|A^+$

Propriétés :

$$\langle \psi | A^+ | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^* \quad (3.38)$$

$$(A^+)^+ = A \quad (3.39)$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+ \quad (3.40)$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+ \quad (3.41)$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \quad (3.42)$$

Remarque : Pour obtenir la matrice qui représente l'opérateur adjoint on transforme les lignes en colonnes et on prend le complexe conjugué.

Exemple :

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow A^+ = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix}$$

3.2.4.6 Conjugaison hermitique :

Pour obtenir le conjugué hermitique d'une expression il faut :

-Remplacer : les constantes par leurs complexes conjugués.

Les bras par les kets associés et les kets par les bras.

Les opérateurs par leurs adjoints.

Inverser l'ordre des facteurs (saufs les constantes. Leur place n'a pas d'importance)

3.2.4.7 Opérateur hermitique :

Un opérateur est dit hermitique s'il coïncide avec son adjoint.

$$A \text{ est hermitique} \Leftrightarrow A = A^+$$

Exemple : l'opérateur projecteur sur un ket est hermitique. En effet,

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

$$P_\psi^+ = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$$

En utilisant la définition d'un opérateur hermitique et la relation (3.38) on obtient :

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^* \quad (3.43)$$

3.3 Equations aux valeurs propres. Observables :

3.3.1 Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur :

3.3.1.1 Définition :

Si un opérateur A agit sur un ket $|\psi\rangle$ et le transforme de sorte que

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad (3.44)$$

λ étant un scalaire, alors on dit que :

λ est valeur propre de A et $|\psi\rangle$ est vecteur propre de A associé à la valeur propre λ .

L'ensemble des valeurs propres de A est appelé spectre de A

L'équation (3.44) est appelée équation aux valeurs propres.

Remarque :

Soit $|\psi\rangle$ un ket propre d'un opérateur A associé à la valeur propre λ et soit $|\psi'\rangle$ un ket proportionnel à $|\psi\rangle$. C'est à dire $|\psi'\rangle = \alpha|\psi\rangle$ tel que α est un nombre complexe quelconque.

On se propose de calculer l'action de A sur $|\psi'\rangle$. On a :

$$A|\psi'\rangle = A\alpha|\psi\rangle = \alpha A|\psi\rangle = \alpha\lambda|\psi\rangle = \lambda\alpha|\psi\rangle = \lambda|\psi'\rangle \quad (3.45)$$

On rappelle que la place des nombres α et λ n'a pas d'importance. On peut les mettre là où on veut.

On a montré que :

Si un ket $|\psi\rangle$ est vecteur propre d'un opérateur A associé à la valeur propre λ , alors tout ket proportionnel à $|\psi\rangle$ ($|\psi'\rangle = \alpha|\psi\rangle$, α étant un nombre quelconque) est aussi vecteur propre de A associé à la même valeur propre.

La valeur propre λ est dite non dégénérée s'il lui correspond un seul vecteur propre (à un facteur multiplicatif près). Autrement dit, si la valeur propre λ est non dégénérée il lui correspond un espace vectoriel propre à une dimension.

λ est dite 'g fois dégénérée' s'il lui correspond g vecteurs propres linéairement indépendants.

3.3.1.2 Equation caractéristique :

Soit $|\psi\rangle$ un vecteur propre d'un opérateur A associé à la valeur propre λ . Supposons que $|\psi\rangle$ se développe sur une base $\{|u_i\rangle\}$ de la manière suivante :

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad (3.46)$$

En multipliant les deux termes de l'équation aux valeurs propres (eq(3.44)) à gauche par le bra $\langle u_i |$, on trouve :

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

En introduisant la relation de fermeture (eq(3.27)),

$$\langle u_i | A \left[\sum_k |u_k\rangle \langle u_k| \right] | \psi \rangle = \lambda c_i$$

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

$$\sum_k A_{ik} c_k = \lambda c_i$$

Qui s'écrit encore,

$$\sum_k A_{ik} c_k = \sum_k \lambda \delta_{ik} c_k$$

$$\sum_k (A_{ik} - \lambda \delta_{ik}) c_k = 0 \quad (3.47)$$

On obtient un système d'équations linéaires (3.47) qui n'a de solution non triviale que si le déterminant de la matrice associée est nul, c'est-à-dire :

$$\text{Det}(A - \lambda I_d) = 0 \quad (3.48)$$

L'équation (3.48) s'appelle 'équation caractéristique'. Sa résolution nous permet de déterminer les valeurs propres et les vecteurs propres correspondants.

3.3.1.3 Exemples d'application :

Exemple1 : Soit un système physique dont l'espace des états est à deux dimensions. $\{|u_i\rangle\}$, $i = 1, 2$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle un opérateur σ_y a la représentation matricielle suivante :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Déterminer ses valeurs propres et ses vecteurs propres.

On résoud l'équation caractéristique :

$$\text{Det}(\sigma_y - \lambda \mathbf{I}_d) = 0$$

$$\begin{vmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - 1 = 0$$

Le spectre de σ_y est $\{-1, 1\}$

Soit $|\varphi_1\rangle$ le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_1 = -1$:

$$\text{On pose } |\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y |\varphi_1\rangle = -|\varphi_1\rangle$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -iy \\ ix \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x \\ -y \end{pmatrix} \Rightarrow y = -ix$$

$$|\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} x \\ -ix \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

L'espace vectoriel propre est un espace à une dimension engendré par le vecteur $\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$

En mécanique quantique on choisit un vecteur normé, alors on impose $\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = 1$

$$(x^* \quad ix^*) \begin{pmatrix} x \\ -ix \end{pmatrix} = 1 \Rightarrow 2|x|^2 = 1 \Rightarrow |x|^2 = \frac{1}{2}$$

Si on choisit x réel et positif, alors $x = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$|\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Son développement sur la base est :

$$|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$$

Soit $|\varphi_2\rangle$ le vecteur propre associé à $\lambda_2 = 1$

$$\text{On pose } |\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y |\varphi_2\rangle = |\varphi_2\rangle$$

$$\begin{pmatrix} -iy \\ ix \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \Rightarrow y = ix$$

$$|\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} x \\ ix \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

Comme dans le cas précédent on obtient un sous espace vectoriel à une dimension engendré cette fois-ci par le vecteur $\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. On impose la relation de normalisation $\langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle = 1$

$$(x^* \quad -ix^*) \begin{pmatrix} x \\ ix \end{pmatrix} = 1 \Rightarrow |x|^2 = \frac{1}{2}$$

Si on choisit x réel et positif on trouve $x = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\text{Donc } |\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Et son développement sur la base est

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |u_2\rangle$$

Exemple2 : Soit un système physique dont l'espace des états est à deux dimensions. $\{|u_i\rangle\}$, $i = 1, 2$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle un opérateur B a la représentation matricielle suivante :

$$B = b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Déterminer ses valeurs propres et ses vecteurs propres.

On résout l'équation caractéristique :

$$\text{Det}(B - \lambda I_d) = 0$$

$$\begin{vmatrix} b-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & b \\ 0 & b & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow (b-\lambda)(\lambda^2 - b^2) = 0$$

On trouve : $\lambda_1 = -b$ qui est non dégénérée car son ordre de multiplicité est égal à 1.

$\lambda_2 = b$ qui est deux fois dégénérée car son ordre de multiplicité est égal à 2.

Soit $|\varphi_1\rangle$ le vecteur propre associé à la valeur propre $\lambda_1 = -b$:

$$\text{On pose } |\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$B|\varphi_1\rangle = -b|\varphi_1\rangle$$

$$b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = -b \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow b \begin{pmatrix} x \\ z \\ y \end{pmatrix} = -b \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow x = 0 \text{ et } z = -y$$

$$|\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ y \\ -y \end{pmatrix} = y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Le sous espace propre associé à la valeur propre $\lambda = -b$ est à 1 dimension. En imposant la relation de normalisation $\langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle = 1$

$$\begin{pmatrix} 0 & y^* & -y^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ y \\ -y \end{pmatrix} = 1 \Rightarrow |y|^2 = \frac{1}{2}$$

Si on choisit y réel et positif on trouve $y = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$$\text{Donc } |\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Et son développement sur la base est

$$|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

On calcule maintenant l'espace vectoriel propre associé à la valeur propre $\lambda_2 = b$:

On pose $|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$

$$B|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle$$

$$b \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \Rightarrow b \begin{pmatrix} x \\ z \\ y \end{pmatrix} = b \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow z = y$$

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} x \\ y \\ y \end{pmatrix} = x \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Le sous espace propre associé à la valeur propre $\lambda = b$ est engendré par les vecteurs $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ et

$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ et comme ces deux vecteurs sont linéairement indépendants ils forment une base dans

le sous espace vectoriel propre. Celui-ci est donc à deux dimensions. Ce résultat était prévisible puisque λ_2 est une racine de l'équation caractéristique d'ordre de multiplicité 2. Elle est donc deux fois dégénérée et il lui correspond deux vecteurs propres linéairement indépendants. Et comme toute combinaison linéaire de ces deux vecteurs propres et aussi vecteur propre, on obtient un espace vectoriel propre à deux dimensions. On rappelle qu'en mécanique quantique on choisit une base orthonormée. En imposant la relation $\langle\varphi|\varphi\rangle = 1$,

on écrit : $(x^* \quad y^* \quad y^*) \begin{pmatrix} x \\ y \\ y \end{pmatrix} = 1 \Rightarrow |x|^2 + 2|y|^2 = 1$

Les deux vecteurs qu'on choisira devront donc vérifier la relation de normalisation ci-dessus.

On choisira par exemple $y = 0$ pour le premier vecteur ce qui donne $x = 1$

$$|\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$|\varphi_2\rangle$ étant choisi, on imposera à $|\varphi_3\rangle$ de lui être orthogonal

$$\langle \varphi_2 | \varphi_3 \rangle = 0 \Rightarrow (1 \quad 0 \quad 0) \begin{pmatrix} x \\ y \\ y \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow x = 0$$

Tenant compte de la relation de normalisation et en choisissant y réel et positif on trouve

$$y = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\text{Donc } |\varphi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Le développement des vecteurs propres sur la base est

$$|\varphi_2\rangle = |u_1\rangle$$

$$|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

3.3.2 Observable :

Un opérateur est une observable si les deux conditions suivantes sont réunies :

- Il est hermitique
- Il est possible de former une base dans l'espace des états avec ses vecteurs propres.

Remarque :

On admet les propriétés suivantes :

- 1-Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.
- 2-Deux vecteurs propres correspondants à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux. Deux vecteurs propres associés à la même valeur propre peuvent être choisis orthogonaux.

Par conséquent, les vecteurs propres d'un opérateur hermitique forment un système orthonormé. Si cet opérateur est une observable, alors ce système est en plus complet et donc il peut servir de base pour étudier un système physique.

3.3.3 Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC):

3.3.3.1 Définition :

Soit un ensemble d'observables qui commutent deux à deux. On peut choisir une base formée par les vecteurs propres communs à ces observables. Si cette base est unique, alors on dit que cet ensemble est un Ensemble Complet d'Observables qui Commutent (ECOC).

3.3.3.2 Exemple d'application :

Soit un système physique dont l'espace des états est à trois dimensions. $\{|u_i\rangle\}, i = 1, 2, 3$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle deux observables H et A ont les représentations matricielles suivantes :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Où ω_0 et a sont des constantes réelles.

1-Vérifier que H et A sont hermitiques.

2-Montrer que H et A commutent. Que peut-on déduire ?

3-Donner les valeurs propres et les vecteurs propres de H et A . En déduire une base de vecteurs propres communs à H et A .

4-Parmi les ensembles d'opérateurs suivants : $\{H\}, \{A\}, \{H, A\}, \{H^2, A\}$ lesquels forment un ECOC ?

Solution :

1-Lorsqu'une matrice représentant un opérateur est symétrique et réelle, cet opérateur est forcément hermitique. C'est le cas des deux matrices qui représentent H et A .

2-On vérifie facilement que H et A commutent en faisant le produit matriciel. On trouve :

$$HA = AH = \hbar\omega_0 a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

On déduit qu'il est possible de former une base dans l'espace des états, formée par les vecteurs propres communs à ces deux observables.

3-La matrice représentant H est diagonale, donc les valeurs propres de H sont les éléments de la diagonale et les vecteurs propres sont les vecteurs de base.

$$\lambda_1 = \hbar\omega_0, \text{ non dégénérée} \rightarrow |u_1\rangle$$

$$\lambda_2 = -\hbar\omega_0, \text{ deux fois dégénérée} \rightarrow |u_2\rangle \text{ et } |u_3\rangle$$

Les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur A ont déjà été calculés (voir l'exemple 2 de la section 3.3.1.3). On avait trouvé :

$$\lambda_1 = -a \rightarrow |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

$$\lambda_2 = a \rightarrow \begin{cases} |\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle \\ |\varphi_3\rangle = |u_1\rangle \end{cases}$$

On cherche la base commune :

On a directement

$$|\varphi_3\rangle = |u_1\rangle \text{ donc } |\varphi_3\rangle \text{ est commun à } H \text{ et } A$$

On remarque que :

$|\varphi_1\rangle$ est une combinaison linéaire de $|u_2\rangle$ et $|u_3\rangle$ qui sont vecteurs propres de H avec la même valeur propre $\lambda_2 = -\hbar\omega_0$. Donc, il appartient à l'espace vectoriel propre de dimension 2, associé à la valeur propre λ_2 qui est 2 fois dégénérée. Par conséquent, $|\varphi_1\rangle$ est aussi vecteur propre de H avec la même valeur propre $\lambda_2 = -\hbar\omega_0$. Ce raisonnement s'applique aussi à $|\varphi_3\rangle$.

En conclusion, l'ensemble des trois vecteurs $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$ constitue une base de vecteurs propres communs à H et A .

4- H à lui seul forme-t-il un ECOC ?

$\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ sont vecteurs propres de H et ils forment une base dans l'espace des états. Mais cette base n'est pas unique. Ceci provient du fait que λ_2 est dégénérée. Il lui correspond deux vecteurs propres linéairement indépendants et par suite, toute combinaison linéaire de ces deux vecteurs propres est aussi vecteur propre avec cette même valeur propre. On peut donc avoir une infinité de bases. Comme exemple on peut citer $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$

En conséquence, $\{H\}$ n'est pas un ECOC.

De même, $\{A\}$ n'est pas un ECOC car $\lambda_2 = a$ est deux fois dégénérée.

$\{H, A\}$ est-il un ECOC ? Le tableau suivant résume les résultats obtenus :

Base commune	H	A
$ \varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} u_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} u_3\rangle$	$-\hbar\omega_0$	$-a$
$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} u_3\rangle$	$-\hbar\omega_0$	a
$ \varphi_3\rangle = u_1\rangle$	$\hbar\omega_0$	a

Toute combinaison linéaire de $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ donnerait un vecteur propre de H , mais il ne serait pas vecteur propre de A car $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont associés à des valeurs propres différentes de A . De même, toute combinaison linéaire de $|\varphi_2\rangle$ et $|\varphi_3\rangle$ donnerait un vecteur propre de A , mais il ne serait pas vecteur propre de H car $|\varphi_2\rangle$ et $|\varphi_3\rangle$ sont associés à des valeurs propres différentes de H . En somme, la base unique $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$ est unique et par conséquent

$\{H, A\}$ est un ECOC.

$\{H^2, A\}$ est-il un ECOC ?

Base commune	H^2	A
$ \varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} u_2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} u_3\rangle$	$\hbar^2\omega_0^2$	$-a$
$ \varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} u_3\rangle$	$\hbar^2\omega_0^2$	a
$ \varphi_3\rangle = u_1\rangle$	$\hbar^2\omega_0^2$	a

Toute combinaison linéaire de $|\varphi_2\rangle$ et $|\varphi_3\rangle$ donnerait un vecteur propre à la fois de H^2 et de A . Cette base commune n'est pas unique et $\{H^2, A\}$ n'est donc pas un ECOC.

3.4 Les représentations $\{|x\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$:

On rappelle les fonctions qui forment des bases continues dans l'ensemble des fonctions d'onde.

Il s'agit de $\xi_x(x') = \delta(x'-x)$, la fonction de Dirac centrée en x

Et $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$, l'onde plane centrée en p . Ici, p est en fait p_x . Nous avons ôté

l'indice x car nous nous sommes limités à une dimension.

$$\xi_x(x') \rightarrow |x\rangle$$

Et donc $\{\xi_x(x')\} \rightarrow \{|x\rangle\}$, et comme $\{\xi_x(x')\}$ forme une base dans F , $\{|x\rangle\}$ forme une base dans l'espace des états. Cette base dans \mathcal{E} est appelée représentation $\{|x\rangle\}$.

$$\text{De même, } v_p(x) \rightarrow |p\rangle$$

Donc, $\{v_p(x)\} \rightarrow \{|p\rangle\}$, et comme $\{v_p(x)\}$ forme une base dans F , $\{|p\rangle\}$ forme une base dans l'espace des états. Cette base dans \mathcal{E} est appelée représentation $\{|p\rangle\}$.

Pour calculer les composantes d'un ket $|\psi\rangle$ sur le vecteur de base $|x\rangle$ il suffit de calculer le produit scalaire de $|\psi\rangle$ par $|x\rangle$, c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \langle x|\psi\rangle &= \int dx' \xi_x^*(x')\psi(x') \\ &= \int dx' \delta(x'-x)\psi(x') = \psi(x) \end{aligned} \quad (3.49)$$

Et les composantes de $|\psi\rangle$ sur $|p\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle p|\psi\rangle &= \int dx v_p^*(x)\psi(x) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x) = \bar{\psi}(p) \end{aligned} \quad (3.50)$$

3.5 Les observables X et P_x :

3.5.1 Définition de X :

On définit X comme étant un opérateur qui agit sur un ket $|\psi\rangle$ et le transforme en $|\psi'\rangle = X|\psi\rangle$ tel que $\psi'(x) = x\psi(x)$.

La relation ci-dessus s'écrit :

$$\begin{aligned} \langle x|\psi'\rangle &= x\langle x|\psi\rangle \\ \langle x|X|\psi\rangle &= x\langle x|\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.51)$$

En représentation $\{|x\rangle\}$, l'opérateur X coïncide avec 'multiplication par x '

3.5.2 Définition de P_x :

On définit P_x comme étant un opérateur qui agit sur un ket $|\psi\rangle$ et le transforme en $|\psi'\rangle = P_x|\psi\rangle$ tel que $\bar{\psi}'(p) = p_x\bar{\psi}(p)$.

$$\langle p | \psi' \rangle = p_x \langle p | \psi \rangle$$

$$\langle p | P_x | \psi \rangle = p_x \langle p | \psi \rangle \quad (3.52)$$

En représentation $\{|p\rangle\}$, l'opérateur P_x coïncide avec 'multiplication par p_x '

Très souvent, on travaille en représentation $\{|x\rangle\}$. On a donc besoin de connaître l'action de P_x dans ce cas, autrement dit,

Si P_x agit sur $|\psi\rangle$ et le transforme en $|\psi'\rangle = P_x |\psi\rangle$, on sait que $\bar{\psi}'(p) = p_x \bar{\psi}(p)$, mais quelle est la relation entre $\psi'(x)$ et $\psi(x)$? On sait que :

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \langle x | \psi' \rangle \\ &= \langle x | P_x | \psi \rangle \\ &= \langle x | \left(\int dp |p\rangle \langle p| \right) P_x | \psi \rangle \\ &= \int dp \langle x | p \rangle \langle p | P_x | \psi \rangle \\ &= \int dp v_p(x) p_x \bar{\psi}(p) \\ &= \int dp v_p(x) p \bar{\psi}(p) \quad (\text{car dans notre cas } p \equiv p_x) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} p \bar{\psi}(p) \quad (3.53) \end{aligned}$$

On rappelle l'équation (3.13):

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \bar{\psi}(p)$$

En comparant les deux expressions (3.13) et (3.53) précédentes, on déduit que,

$$\psi'(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \quad (3.54)$$

$$\text{Qui s'écrit encore : } \langle x | P_x | \psi \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x | \psi \rangle \quad (3.55)$$

Conclusion : En représentation $\{|x\rangle\}$, P_x coïncide avec 'dérivation par rapport à x ensuite, multiplication par $-i\hbar$ '.

Exercices

Exercice1 :

1- $\varphi(x)$ et $\psi(x)$ sont des fonctions qui appartiennent à l'ensemble des fonctions d'onde. Montrer les relations suivantes :

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$$

$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$$

$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1(\varphi_1, \psi) + \lambda_2(\varphi_2, \psi)$$

2- Soit $\{U_i(x)\}$, une base dans F . Ecrire les relations satisfaites par les éléments de cette base.

3- Soit $\psi(x) = \sum_i c_i U_i(x)$, c_i étant les composantes de $\psi(x)$ sur $U_i(x)$. Montrer que $c_i = (U_i, \psi)$.

Exercice2 : On considère les états $|\psi\rangle = 3i|\varphi_1\rangle - 7i|\varphi_2\rangle$ et $|\chi\rangle = -|\varphi_1\rangle + 2i|\varphi_2\rangle$ où $|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont orthonormés.

1- Calculer $|\psi + \chi\rangle$ et $\langle\psi + \chi|$

2- Calculer les produits scalaires $\langle\psi|\chi\rangle$ et $\langle\chi|\psi\rangle$, comparer.

3- Calculer la trace de l'opérateur $|\psi\rangle\langle\chi|$

Exercice n°3: Montrer les propriétés suivantes des commutateurs

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \text{ et } [AC, B] = A[C, B] + [A, B]C$$

Exercice4 :

Soit $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ une base orthonormée. On définit les kets $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$ par :

$$|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{i}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle \quad |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|u_1\rangle + \frac{i}{\sqrt{3}}|u_3\rangle$$

1- Ces kets sont-ils normés ?

2- Calculer les matrices ρ_0 et ρ_1 représentant dans la base $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ les opérateurs projecteurs sur $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$. Vérifier que ces matrices sont hermitiques.

Exercice5 :

Démontrer les propriétés suivantes :

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

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

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

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

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

Exercice6 :

Considérons l'opérateur dont la matrice dans une base orthonormée $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ s'écrit :

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

1- σ_y est-il hermitique ? Calculer ses valeurs propres et ses vecteurs propres.

2-Calculer les matrices représentant les projecteurs sur ces vecteurs propres. Vérifier alors que ceux-ci satisfont à des relations d'orthogonalité et de fermeture.

Exercice7 :

1- Soit un système physique dont l'espace des états est à 3 dimensions. $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle deux observables A et B ont les représentations matricielles suivantes :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2i \\ 0 & 2i & 0 \end{pmatrix}$$

1-A et B sont-ils hermitiques ?

2-Montrer que A et B commutent. Donner une base de vecteurs propres communs à A et B

3-L'ensemble $\{A, B\}$ forme-t-il un ECOC ?

Chapitre 4 Les postulats de la mécanique quantique

4.1 Introduction :

Les théories se construisent à partir de postulats, et c'est l'expérience qui juge de la validité de ces postulats et donc de la théorie entière. La validité de la mécanique quantique a été largement confirmée par l'expérience. Dans ce chapitre on résume les postulats en six parties.

4.2 Enoncés des postulats :

4.2.1 Premier postulat :

A un instant t fixé, l'état d'un système est complètement défini par la connaissance de son vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$.

4.2.2 Deuxième postulat :

Toute grandeur physique A est décrite par une observable A agissant dans l'espace des états.

4.2.3 Troisième postulat :

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

le troisième postulat explique la quantification que l'on observe pour certaines grandeurs.

4.2.4 Quatrième postulat :

On distingue deux cas :

4.2.4.1 Cas d'un spectre discret :

On considère une grandeur physique A . Elle est décrite par une observable A , dont le spectre discret est $a_n (n \in N)$. Soit $|u_n\rangle$, le vecteur propre associé à la valeur propre a_n .

Si a_n est non dégénérée on écrit:

$$A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle \quad (4.1)$$

Et comme A est une observable, ses vecteurs propres forment une base dans l'espace des états et donc un ket quelconque $|\psi\rangle$ peut s'écrire :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \quad (4.2)$$

Le quatrième postulat dit que si l'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état normé $|\psi\rangle$, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat de la mesure la valeur propre a_n est :

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2 \quad (4.3)$$

Si a_n est dégénérée g_n fois, on écrit:

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \quad (4.4)$$

Et un ket quelconque $|\psi\rangle$ s'écrit :

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \quad (4.5)$$

Dans ce cas, Le quatrième postulat dit que :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \quad (4.6)$$

Enoncé du quatrième postulat :

Si l'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état normé $|\psi\rangle$, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat de la mesure la valeur propre a_n est :

$$P(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = |c_n|^2 \quad \text{si } a_n \text{ non dégénérée}$$

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \quad \text{si } a_n \text{ est dégénérée } g_n \text{ fois}$$

La mécanique quantique est donc indéterministe. Il n'y a aucun moyen de prévoir à l'avance le résultat d'une mesure. On ne peut savoir que la probabilité d'obtenir tel ou tel résultat.

Remarque :

Considérons P_n , le projecteur sur le sous espace vectoriel ε_n associé à a_n . Son action sur $|\psi\rangle$ est :

$$P_n|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \quad (4.7)$$

$$\text{Et } |P_n|\psi\rangle|^2 = \langle \psi | P_n^\dagger P_n | \psi \rangle \quad (4.8)$$

$$= \langle \psi | P_n P_n | \psi \rangle = \langle \psi | P_n | \psi \rangle \quad (4.9)$$

$$= \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \quad (4.10)$$

$$= P(a_n) \quad (4.11)$$

$|\psi_n\rangle = P_n|\psi\rangle$ représente la partie de $|\psi\rangle$ qui se trouve dans ε_n . Ainsi, la probabilité de trouver a_n n'est rien d'autre que le carré de la norme de cette partie $|\psi_n\rangle$. (On rappelle que $|\psi\rangle$ est un ket normé.

4.2.4.2 Cas d'un spectre continu :

Nous allons considérer uniquement le cas d'un spectre continu non dégénéré. Soit une grandeur physique A dont l'observable associée est à spectre continu, non dégénéré. On écrit alors :

$A|v_\alpha\rangle = \alpha|v_\alpha\rangle$ où α prend des valeurs continues. Les $\{|v_\alpha\rangle\}$ forment une base continue sur laquelle se développe un ket normé $|\psi\rangle$ de la manière suivante :

$$|\psi\rangle = \int c(\alpha)|v_\alpha\rangle d\alpha$$

Dans ce cas, si on mesure la grandeur physique A sur l'état $|\psi\rangle$, on ne peut obtenir qu'un résultat compris entre une certaine valeur α et $\alpha + d\alpha$. On définit alors $dP(\alpha)$ comme étant la probabilité d'obtenir ce résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ par :

$$dP(\alpha) = \rho(\alpha)d\alpha \quad (4.12)$$

$\rho(\alpha)$ étant la densité de probabilité d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$. Elle est donnée par :

$$\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 \quad (4.13)$$

Enoncé du quatrième postulat dans le cas d'un spectre continu et non dégénéré :

Si l'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état normé $|\psi\rangle$, la probabilité $dP(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ est :

$$dP(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \quad (4.14)$$

Où $|v_\alpha\rangle$ est le vecteur propre associé à la valeur propre α de l'observable associée A .

Exemple :

On veut mesurer la grandeur physique 'position' X sur un système dans l'état $|\psi\rangle$. L'observable associée étant X , on écrit :

$$X|x\rangle = x|x\rangle \quad (4.15)$$

$$\text{Et } |\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx \quad (4.16)$$

$$= \int \psi(x) |x\rangle dx \quad (4.17)$$

La probabilité d'obtenir un résultat compris entre x et $x + dx$ est :

$$dP(x) = |\langle x|\psi\rangle|^2 dx = |\psi(x)|^2 dx \quad (4.18)$$

$|\psi(x)|^2$ représente la densité de probabilité de trouver le système dans une position comprise entre x et $x + dx$.

4.2.4.3 Valeur moyenne d'une observable :

On considère un grand nombre de systèmes tous dans l'état $|\psi\rangle$ normé, sur lesquels on mesure une grandeur physique A . On obtient alors toutes les valeurs propres a_n de l'observable associée A distribuées selon $P(a_n)$, et on définit la valeur moyenne de A dans le cas non dégénéré:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_n a_n P(a_n) \quad (4.19) \\ &= \sum_n a_n |\langle u_n | \psi \rangle|^2 = \sum_n \langle \psi | a_n | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | A | u_n \rangle \langle u_n | \psi \rangle = \langle \psi | A \left(\sum_n | u_n \rangle \langle u_n | \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | A | \psi \rangle \quad (4.20) \end{aligned}$$

4.2.4.3 Ecart quadratique moyen :

On appelle écart quadratique moyen

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \quad (4.21)$$

4.2.5 Cinquième postulat :

Si on veut mesurer A sur l'état $|\psi\rangle$ normé, et on connaît $|\psi\rangle$ immédiatement avant la mesure, on sait qu'on ne peut pas prévoir le résultat de la mesure, mais, on sait calculer les probabilités d'obtenir tel ou tel résultat. Supposons qu'on effectue la mesure et qu'on trouve comme résultat a_n . On a donc immédiatement après la mesure une information supplémentaire et par conséquent l'état du système à cet instant précis est différent de $|\psi\rangle$. Celui-ci a donc subi une brusque modification. En mécanique quantique, toute mesure perturbe le système d'une manière incontrôlée. Le cinquième postulat nous donne cet état immédiatement après la mesure.

Si a_n est non dégénérée, l'état du système immédiatement avant la mesure est :

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle \quad (4.22)$$

Dans ce cas on postule que l'état du système immédiatement après la mesure est $|u_n\rangle$

$$|\psi_{\text{après}}\rangle = |u_n\rangle \quad (4.23)$$

Maintenant on va généraliser ce résultat au cas où a_n est g_n fois dégénérée, on a :

$$\text{Immédiatement avant la mesure : } |\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle \quad (4.24)$$

Immédiatement après la mesure l'état du système devient:

$$|\psi_{\text{après}}\rangle = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \quad (4.25)$$

C'est-à-dire, la partie normée de $|\psi\rangle$ qui se trouve dans le sous espace vectoriel propre ε_n associé à a_n .

Trouvons une autre expression de (4.25)

$$\begin{aligned} \text{On a } \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle &= \sum_{i=1}^{g_n} \langle u_n^i | \psi \rangle |u_n^i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = P_n |\psi\rangle \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \text{Et : } \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 &= \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left(\sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | P_n | \psi \rangle \end{aligned} \quad (4.27)$$

D'où :

$$|\psi_{\text{après}}\rangle = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad (4.28)$$

Enoncé du cinquième postulat :

Si le résultat de mesure d'une grandeur physique A sur un système physique dans l'état $|\psi\rangle$ donne comme résultat a_n , alors l'état de ce système immédiatement après la mesure est la projection normée $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$ de $|\psi\rangle$ sur le sous espace propre associé à a_n .

4.2.6 Sixième postulat :

On postule que l'évolution dans le temps de l'état d'un système est régie par l'équation de Schrödinger, et ce postulat s'énonce de la façon suivante :

Enoncé du sixième postulat :

L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est gouvernée par l'équation de Schrödinger qui s'écrit dans le cas général :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (4.29)$$

Où $H(t)$ est l'hamiltonien du système. C'est l'observable associée à l'énergie totale de ce système.

4.3 Evolution de la valeur moyenne d'une observable :

Dans ce paragraphe, nous allons voir comment évolue la valeur moyenne d'une observable au cours du temps. Cette étude nous permettra d'établir un lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique.

Soit $|\psi(t)\rangle$, un ket normé. La valeur moyenne d'une observable A dans cet état $|\psi(t)\rangle$ est

$$\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \langle A\rangle(t) \quad (4.30)$$

Cette valeur moyenne peut changer avec le temps à travers $|\psi(t)\rangle$ qui évolue conformément à l'équation de Schrödinger, ou à travers A qui peut éventuellement dépendre elle-même explicitement du temps. Calculons sa dérivée par rapport au temps :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A\rangle(t) &= \frac{d}{dt} \langle\psi(t)|A(t)|\psi(t)\rangle \\ &= \left[\frac{d}{dt} \langle\psi(t)| \right] A(t) |\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)| \frac{\partial A}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)| A(t) \left[\frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right] \end{aligned}$$

Or,

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

Donc,

$$\frac{d}{dt} \langle A\rangle(t) = -\frac{1}{i\hbar} \langle\psi(t)| H(t) A(t) |\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)| \frac{\partial A}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle\psi(t)| A(t) H(t) |\psi(t)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (4.31)$$

Généralement, la grandeur physique A d'une particule sans spin dépend de x , p et t . Les grandeurs x et p évoluent avec le temps (équations de Hamilton) et donc A dépend du temps implicitement et explicitement. Quand on passe à la mécanique quantique, on associe l'observable $A(X, P, t)$. Mais X et P ne dépendent pas du temps car leurs valeurs propres et vecteurs propres associés n'en dépendent pas. Où se trouve alors cette dépendance temporelle qui caractérise l'évolution du système? Elle se trouve reportée dans le vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$. Si on travaille par exemple en représentation $\{|x\rangle\}$, cette dépendance temporelle se retrouve dans $\langle x|\psi(t)\rangle$, composante de $|\psi(t)\rangle$ sur $|x\rangle$, Autrement dit, la fonction d'onde $\psi(x, t)$.

4.4 Théorème d'Ehrenfest :

On veut étudier l'évolution dans le temps des observables X et P . Pour cela on considère une particule plongée dans un potentiel stationnaire (c'est-à-dire, qui ne dépend pas du temps) $V(x)$.

On a d'après la relation (4.31):

$$\frac{d}{dt}\langle X \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [X, H] \rangle \quad (4.32)$$

$$\frac{d}{dt}\langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [P, H] \rangle \quad (4.33)$$

Comme le potentiel ne dépend pas explicitement du temps, il en est de même pour l'Hamiltonien du système. Celui-ci s'écrit alors:

$$H(X, P) = \frac{P^2}{2m} + V(X) \quad (4.34)$$

Calculons le commutateur $[X, H]$:

$$[X, H] = \frac{1}{2m}[X, P^2] + [X, V(X)] \quad (4.35)$$

Et :

$$[X, P^2] = P[X, P] + [X, P]P \quad (4.36)$$

$$= 2i\hbar P \quad (4.37)$$

Donc :

$$\frac{d}{dt}\langle X \rangle = \frac{1}{m}\langle P \rangle \quad (4.38)$$

On calcule $\langle [P, H] \rangle$:

$$[P, H] = \left[P, \frac{P^2}{2m} + V(X) \right] \quad (4.39)$$

$$= [P, V(X)] \quad (4.40)$$

On a la propriété suivante :

$$[P, G(X)] = -i\hbar G'(X) \quad (4.41)$$

Ce qui donne :

$$[P, H] = -i\hbar \frac{d}{dX} V(X) \quad (4.42)$$

Donc :

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = - \left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle \quad (4.43)$$

Finalement on a trouvé deux équations (4.38) et (4.43) qui constituent le théorème d'Ehrenfest.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \langle X \rangle = \frac{1}{m} \langle P \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle = - \left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle \end{array} \right.$$

En combinant ces deux équations on trouve :

$$m \frac{d^2 \langle X \rangle}{dt^2} = - \left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle \quad (4.44)$$

Le deuxième terme de cette l'équation (4.44) représente la force. Cette équation rappelle celle de Newton. Peut-on alors dire que l'équation de Newton découle de l'équation de Schrödinger ?

En réalité, $\psi(x, t)$ qui décrit l'état d'un corpuscule est un paquet d'onde. L'ensemble des points $\langle X \rangle(t)$ constitue la trajectoire du paquet d'onde qui n'a rien à avoir avec la trajectoire de la particule (qui n'a d'ailleurs pas de signification physique). Mais dans le cas où l'extension du paquet d'onde (c'est-à-dire la distance où la probabilité de présence de la particule est significative) est faible par rapport aux dimensions mises en jeu, on peut assimiler le paquet d'onde à son centre. C'est uniquement dans ce cas qui est une limite classique qu'on peut dire que le centre du paquet d'onde obéit à la loi de Newton.

En effet :

$$-\left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle \neq -\frac{d}{dx} V(x) \Big|_{x=\langle X \rangle} \quad (4.45)$$

Le premier terme représente la moyenne de la force sur tout le paquet d'onde alors que le deuxième terme est la force classique au centre du paquet d'onde.

Mais à la limite classique, c'est-à-dire si le paquet d'onde est suffisamment localisé, on a :

$$\left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle = \langle \psi(t) | \frac{d}{dX} V(X) | \psi(t) \rangle \quad (4.46)$$

Et en insérant la relation de fermeture,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle &= \int dx \langle \psi(t) | x \rangle \langle x | \frac{d}{dX} V(X) | \psi(t) \rangle \\ &= \int dx \psi^*(x, t) \left[\frac{d}{dx} V(x) \right] \psi(x, t) \\ &= \int dx |\psi(x, t)|^2 \frac{d}{dx} V(x) \quad (4.47) \end{aligned}$$

À la limite classique (ou macroscopique), le paquet d'onde est assimilable à son centre. Dans ce cas la densité de probabilité de présence $|\psi(x, t)|^2$ et par suite, l'intégrale ne prend des valeurs significatives que sur une très faible distance de part et d'autre du centre du paquet d'onde. Cette distance est suffisamment faible pour pouvoir considérer la quantité $\frac{d}{dx} V(x)$ constante, égale à sa valeur au centre du paquet d'onde. On obtient alors,

$$\left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle \approx \left. \frac{d}{dx} V(x) \right|_{x=\langle X \rangle} \int dx |\psi(x, t)|^2 \quad (4.48)$$

$$\left\langle \frac{d}{dX} V(X) \right\rangle \approx \left. \frac{d}{dx} V(x) \right|_{x=\langle X \rangle} \quad (4.49)$$

puisque $\int dx |\psi(x, t)|^2 = 1$

On conclue donc que l'équation de Newton découle de l'équation de Schrödinger mais uniquement dans des conditions limites satisfaites par les systèmes macroscopiques.

4.5 Systèmes conservatifs :

Un système est dit conservatif si son hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps.

4.5.1 Résolution de l'équation de Schrödinger :

Considérons un système physique conservatif dans l'état $|\psi(t)\rangle$. L'équation aux valeurs propres de son hamiltonien s'écrit :

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (4.50)$$

Comme H est une observable, les $\{|\varphi_n\rangle\}$ forment une base sur laquelle on peut développer $|\psi(t)\rangle$. Le système étant conservatif, H et par suite E_n et $|\varphi_n\rangle$ ne dépendent pas explicitement du temps. La dépendance temporelle de $|\psi(t)\rangle$ se trouve dans ses composantes. On écrit alors :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\varphi_n\rangle \quad (4.51)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad (4.52)$$

En projetant sur $|\varphi_n\rangle$,

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

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle\varphi_n|\psi(t)\rangle = \langle\varphi_n|H|\psi(t)\rangle \quad (\text{puisque les } \langle\varphi_n| \text{ ne dépendent pas du temps})$$

Comme H est hermitique, ses valeurs propres sont réelles et l'expression conjuguée de (4.50) s'écrit :

$$\langle\varphi_n|H = E_n\langle\varphi_n| \quad (4.53)$$

D'autre part, on sait que :

$$\langle\varphi_n|\psi(t)\rangle = c_n(t) \quad (4.54)$$

Ce qui donne,

$$i\hbar \frac{d}{dt}c_n(t) = E_n c_n(t) \quad (4.55)$$

On obtient une équation différentielle à variables séparables qu'on intègre facilement

$$\int_0^t \frac{dc_n(t)}{c_n(t)} = -\frac{i}{\hbar} E_n \int_0^t dt$$

$$c_n(t) = c_n(0)e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \quad (4.56)$$

Connaissant l'état d'un système à instant donné (qu'on choisit nul pour simplifier),

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)|\varphi_n\rangle \quad (4.57)$$

On peut déterminer cet état à un instant ultérieur en écrivant :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle \quad (4.58)$$

Remarque : La mécanique quantique est déterministe quand il s'agit de l'évolution d'un système physique. L'indéterminisme apparaît uniquement lors de la mesure d'une grandeur physique.

4.5.2 Constantes du mouvement :

Une constante du mouvement est une observable qui ne dépend pas explicitement du temps et qui commute avec l'hamiltonien. C'est-à-dire :

$$\begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \\ [A, H] = 0 \end{cases} \quad (4.59)$$

Pour un système conservatif, H est une constante du mouvement puisqu'il ne dépend pas explicitement du temps et il commute avec lui-même.

4.5.3 Fréquences de Bohr d'un système :

Soit un système dans l'état $|\psi(t)\rangle$, et une observable B . Si ce système est conservatif, on peut connaître $|\psi(t)\rangle$ à chaque instant et par suite on peut calculer $\langle B \rangle$

On a :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} |\varphi_n\rangle \Rightarrow \langle \psi(t) | = \sum_n c_n^*(0) e^{\frac{iE_n t}{\hbar}} \langle \varphi_n | \quad (4.59)$$

$$\begin{aligned} \langle B(t) \rangle &= \langle \psi(t) | B | \psi(t) \rangle \\ &= \sum_{n,n'} c_{n'}^*(0) c_n(0) e^{\frac{i(E_{n'} - E_n)t}{\hbar}} \langle \varphi_{n'} | B | \varphi_n \rangle \end{aligned} \quad (4.60)$$

Comme le système est conservatif, les états propres de H ne dépendent pas du temps. Donc si B ne dépend pas explicitement du temps, les éléments de matrice $\langle \varphi_{n'} | B | \varphi_n \rangle$ sont constants. Dans ce cas, $\langle B \rangle(t)$ valeur moyenne de B dans $|\psi(t)\rangle$ oscille avec des fréquences $\nu_{n',n}$ données par :

$$\nu_{n',n} = \frac{1}{2\pi} \frac{|E_{n'} - E_n|}{\hbar} \quad (4.61)$$

$$= \frac{|E_{n'} - E_n|}{h} \quad (4.62)$$

Ces fréquences sont appelés 'fréquences de Bohr' et caractérisent le système étudié.

4.5.4 Relation d'incertitude temps-énergie :

Soit un système physique qui à l'instant $t=0$ est dans un état $|\psi(0)\rangle$ qui est une superposition de deux états propres de l'hamiltonien, associés à des valeurs propres différentes E_1 et E_2 .

$$|\psi(0)\rangle = c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle \quad (4.63)$$

Et à un instant ultérieur l'état devient :

$$|\psi(t)\rangle = c_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} |\varphi_1\rangle + c_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} |\varphi_2\rangle \quad (4.64)$$

Commençons par déterminer l'incertitude sur l'énergie du système. D'après le troisième postulat une mesure de l'énergie dans l'état $|\psi(t)\rangle$ ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de H , autrement dit E_1 ou E_2 . L'incertitude sur l'énergie est donc :

$$\Delta E = |E_1 - E_2| \quad (4.65)$$

Voyons maintenant l'intervalle de temps dans lequel ce système peut évoluer. Pour cela, considérons une observable B et calculons la probabilité pour qu'une mesure de B sur $|\psi(t)\rangle$ donne comme résultat la valeur propre (discrète et non dégénérée pour simplifier) b_n associée au vecteur propre $|u_n\rangle$.

Le quatrième postulat dit :

$$\begin{aligned} P(b_n, t) &= |\langle u_n | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= \left| c_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \langle u_n | \varphi_1 \rangle + c_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \langle u_n | \varphi_2 \rangle \right|^2 \\ &= \left(c_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \langle u_n | \varphi_1 \rangle + c_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \langle u_n | \varphi_2 \rangle \right)^* \left(c_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \langle u_n | \varphi_1 \rangle + c_2 e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} \langle u_n | \varphi_2 \rangle \right) \\ &= |c_1|^2 |\langle \varphi_1 | u_n \rangle|^2 + |c_2|^2 |\langle \varphi_2 | u_n \rangle|^2 + c_1^* c_2 e^{\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \langle \varphi_1 | u_n \rangle \langle u_n | \varphi_2 \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 e^{-\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \langle \varphi_1 | u_n \rangle^* \langle u_n | \varphi_2 \rangle^* \\ &= |c_1|^2 |\langle \varphi_1 | u_n \rangle|^2 + |c_2|^2 |\langle \varphi_2 | u_n \rangle|^2 + 2 \operatorname{Re} \left(c_2^* c_1 e^{-\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}} \langle \varphi_1 | u_n \rangle^* \langle \varphi_2 | u_n \rangle \right) \quad (4.66) \end{aligned}$$

Cette probabilité est contrôlée par la variation de l'énergie $\Delta E = |E_1 - E_2|$. Elle oscille entre deux valeurs extrêmes à la fréquence de Bohr $\nu_{2,1} = \frac{E_2 - E_1}{h}$, et le temps d'évolution du système est de l'ordre de $\Delta t \approx \frac{h}{|E_2 - E_1|}$.

$$\Delta E \Delta t \approx h$$

On a obtenu finalement la relation d'incertitude temps-énergie introduite dans le chapitre1 (paragraphe 1.8).

Exercices

Exercice1 :

Nous reprenons le puits de potentiel infini de largeur $2a$ tel que $-a \leq x \leq a$. Nous appelons $|\phi_n\rangle$ les états propres orthonormés de l'hamiltonien du système, de valeurs propres

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

Supposons que la particule se trouve dans un état donné par le ket $|\psi\rangle$ qui s'écrit dans la base $\{|\phi_n\rangle\}$: $|\psi\rangle = a_1|\phi_1\rangle + a_2|\phi_2\rangle$

1-Rappeler les relations que doivent vérifier les éléments de la base. Sachant que $|\psi\rangle$ est normé, donner la relation entre a_1 et a_2 .

2-On veut mesurer l'énergie. Quelles sont les résultats que nous pouvons trouver et avec quelles probabilités ?

3-Trouver la valeur moyenne et l'écart quadratique moyen de l'énergie (toujours dans cet état). On donne $a_1 = a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Sans refaire les calculs, quel serait l'écart quadratique moyen dans l'état donné par $|\psi\rangle = |\phi_1\rangle$ ou $|\psi\rangle = |\phi_2\rangle$.

Exercice2 :

Soit un système physique dont l'espace des états est à 3 dimensions. $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, |\varphi_3\rangle\}$ est une base orthonormée de cet espace dans laquelle l'hamiltonien H ainsi qu'une observable A ont les représentations matricielles suivantes :

$$H = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{où } \omega_0 \text{ et } a \text{ sont des paramètres positifs.}$$

A l'instant $t=0$, le système physique se trouve dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_1\rangle + \frac{1}{2}|\varphi_2\rangle + \frac{1}{2}|\varphi_3\rangle.$$

1-A est-elle une constante du mouvement ?

2-A l'instant $t=0$ nous mesurons l'énergie du système. Quelles sont les résultats possibles ? avec quelles probabilités ? Calculer aussi la valeur moyenne de l'énergie dans cet état, ainsi que l'écart quadratique moyen de l'énergie dans cet état.

3-A l'instant $t=0$, nous mesurons en fait, A au lieu de H . Donner les résultats possibles avec leurs probabilités respectives. Quel est l'état immédiatement après la mesure ?

4-Donner $|\psi(t)\rangle$ à un instant ultérieur.

5-Calculer la valeur moyenne $\langle A \rangle(t)$ de A à l'instant t. Quelles remarques peut-on faire?

6-Quels résultats obtient-on si l'on mesure à l'instant t l'observable A ? Interpréter.

REFERENCES

- 1-C.Tannoudji , B.Diu et F, Mécanique Quantique, Tome1, Edition Hermann (1997)
- 2-R.P. Feynman, Mécanique quantique, Inter Edition, Paris(1979)
- 3-C.Piron, Mecanique Quantique : Bases et Applications, Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, (1998).
- 4-A.Tellez-Arenas, Mécanique Quantique : Travaux dirigés, Masson (1976)
- 5-R.Omnes, Les indispensables de la mécanique quantique. Collection Sciences, Odile Jacob, (2006).
- 6-Ch.Ngo et H.Ngo, Physique Quantique, Masson (1991)
- 7-M.Hulin, Introduction à la physique atomique et à la mécanique quantique Armand Collin(1974).
- 8-H.Bouchriha, Introduction à la physique quantique, Centre de Publications Universitaires, Tunis (2002)
- 9-N-Zettili, Quantum Mecanics, Concepts and Applications, Edition Willey (2001)