PRINCIPES DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

Mots clés de la description quantique d'un système physique

- Etats du système
- « observables » de ce système
- Evolution temporelle du système

Relations d'incertitude :

Avec quel degré de précision peut-on espérer connaître plusieurs grandeurs physiques simultanément ?

Quand a-t-on besoin de la mécanique quantique ?

PHYSIQUE NEWTONIENNE OU PHYSIQUE ONDULATOIRE ?

Particule ponctuelle de masse *m* (non relativiste)

$$\left\{\vec{r}(t), \vec{p}(t)\right\}$$

Newton

Position et impulsion réelles

$$\psi(\vec{r}, t)$$

Schrödinger

ψ est continue et $\int \left|\psi(\vec{r}, t)\right|^2 d^3r = 1$

description probabiliste : $d^3P = \left|\psi(\vec{r}, t)\right|^2 d^3r$

Les concepts classiques cessent de s'appliquer quand :

Action caractéristique $\approx$ constante de Planck *h*

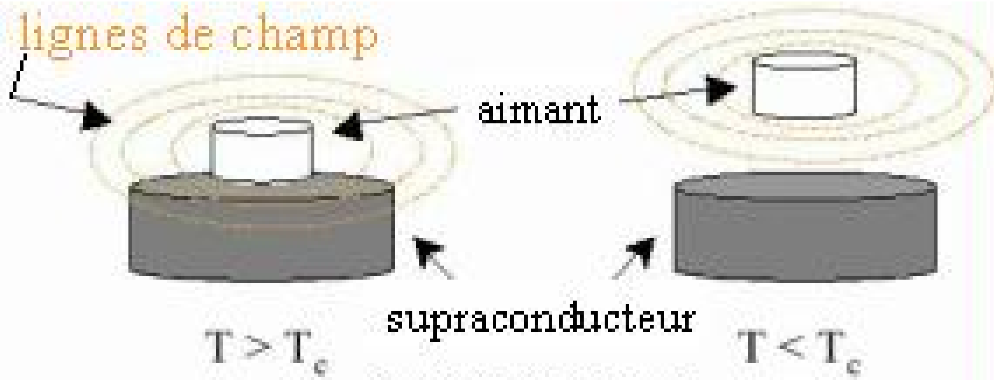
Avec :

Action = longueur caractéristique x impulsion caractéristique

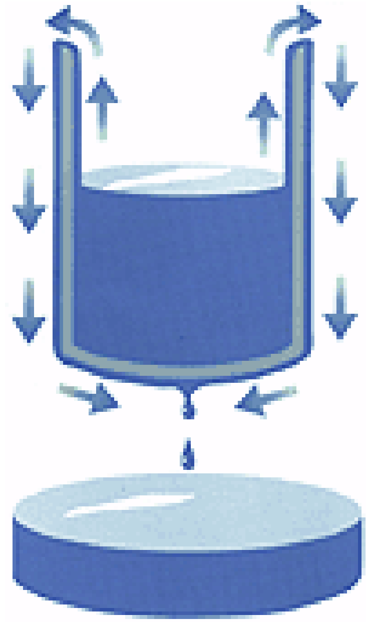
LA PHYSIQUE QUANTIQUE PEUT EGALEMENT ETRE MACROSCOPIQUE

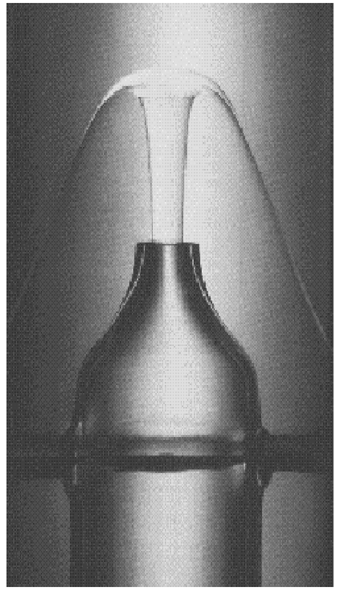
Superfluidité de l'hélium liquide à basse température (T<2,3K).

Supraconductivité de certains métaux à basse température.



lévitation





Effet « fontaine »

Caractère quantique marqué si :

distance entre voisins < longueur d'onde de de Broglie

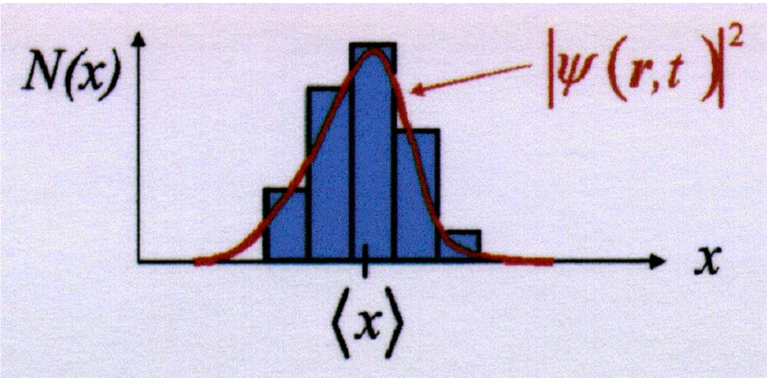
Mesures sur une particule ponctuelle

Particule ponctuelle de masse *m* dans un état $\psi(\vec{r},t)$

Mesure de position

Le résultat n'est pas certain : variable aléatoire de densité de probabilité $\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2$

Si on effectue une mesure de position sur un grand nombre de particules, toutes préparées dans le même état $\psi(\vec{r},t)$, on peut tracer un histogramme :



Position moyenne

$$\langle x\rangle = \int x\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \int \psi^*(\vec{r},t)\, x\psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

$$\Rightarrow \langle \vec{r}\rangle = \int \vec{r}\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \int \psi^*(\vec{r},t)\,\vec{r}\psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

Mesure d'impulsion

$$\langle \vec{p}\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)\, d^3r$$

Mesures sur une particule ponctuelle

A toute grandeur de la physique newtonienne $A(\vec{r},\vec{p})$, on associe un opérateur $\hat{A}$ tel que

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\left[\hat{A}\,\psi(\vec{r},t)\right] d^3r$$

Action de l'opérateur position $\hat{\vec{r}}$ sur la fonction d'onde : multiplication par $\vec{r}$

Action de l'opérateur impulsion $\hat{\vec{p}}$ sur la fonction d'onde : $\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$

Opérateur moment cinétique $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}}$

$$\Rightarrow \text{Action sur } \psi(\vec{r},t) : \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right), \hat{L}_x = \cdots, \hat{L}_y = \cdots$$

FORMULATION GENERALE DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

L'état d'un système est caractérisé par un vecteur $\left|\psi(t)\right\rangle$ d'un espace de Hilbert.

Particule ponctuelle : $\psi(\vec{r},t)$

Atome d'hydrogène : $\psi\left(\vec{r}_{\text{élec.}},\vec{r}_{\text{prot.}},t\right)$

Fonctions de carré sommable

Autres types de degré de liberté : moment magnétique, spin, polarisation…

$\rightarrow$ *Espaces de dimension finie*

Le vecteur $\left|\psi(t)\right\rangle$ est normé : $\left\|\psi(t)\right\|^2 = \left\|\left|\psi(t)\right\rangle\right\|^2 = \left\langle\psi(t)\middle|\psi(t)\right\rangle = 1$

$\rightarrow$ *généralisation de* $\int\left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = 1$

OBSERVABLES

Relation entre le formalisme et les quantités physiquement mesurables

➡ A toute grandeur physique *A*, on associe un opérateur $\hat{A}$ agissant dans l'espace de Hilbert.

En dimension finie, $\hat{A}$ *est une matrice carrée*

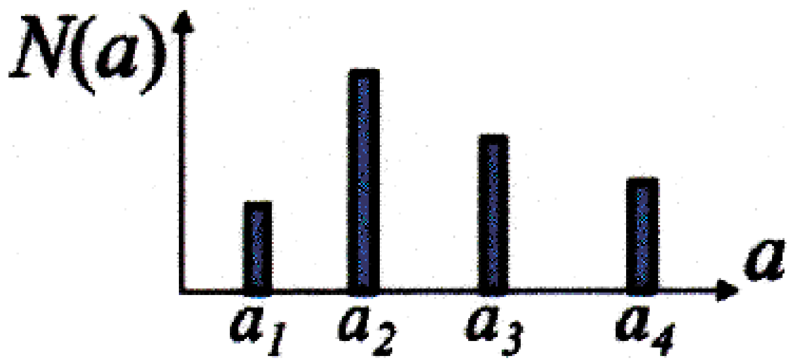
➡ Les opérateurs $\hat{A}$ associés aux grandeurs physiques sont hermitiens

$$\hat{A} = \hat{A}^{\dagger} \rightarrow \underbrace{\langle \psi_1 |}_{\text{vecteur ligne}} \underbrace{\hat{A}}_{\text{matrice carrée}} \underbrace{| \psi_2 \rangle}_{\text{vecteur colonne}} = \left(\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle \right)^{*}$$ ***Observables***

MESURES INDIVIDUELLES

Le principe énoncé pour une particule ponctuelle se généralise à tout système physique :

La valeur moyenne des résultats d'une mesure de *A*, effectuée sur un grand nombre de systèmes tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$ vaut :



$$\langle A\rangle = \frac{\sum_i a_i N(a_i)}{\sum_i N(a_i)} = \langle\psi|A|\psi\rangle \,(\text{réel})$$

généralisation de $\langle A\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\left[\hat{A}\,\psi(\vec{r},t)\right] d^3r$

Mais quels sont les résultats individuels possibles a_i et leur probabilité p_i ?

MESURES INDIVIDUELLES

Principe :

- Dans une mesure de A, les seuls résultats possibles sont les valeurs propres a_α de $\hat{A}$.

- La probabilité de trouver la valeur propre a_α, de vecteur propre associé $|\psi_\alpha\rangle$ est :

$$P(a_\alpha) = |\langle \psi_\alpha | \psi \rangle|^2$$

Ceci est bien cohérent :

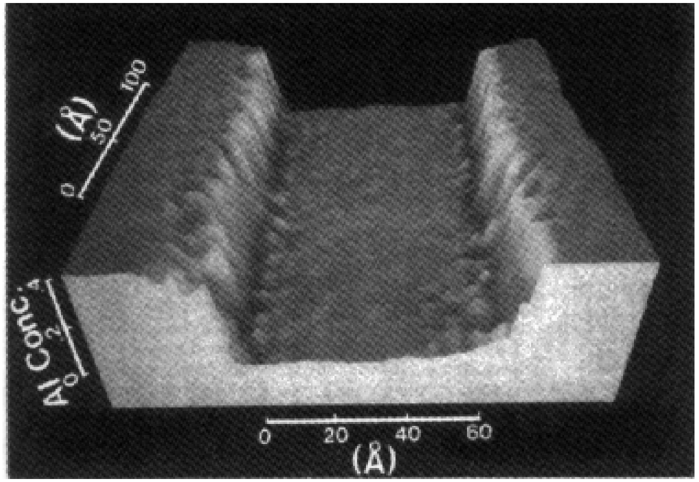
$$\langle A \rangle = \sum_\alpha a_\alpha P(a_\alpha) = \sum_\alpha a_\alpha \langle \psi | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\alpha | \psi \rangle = \sum_\alpha \langle \psi | \hat{A} | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\alpha | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | \hat{A} \left(\sum_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| \right) | \psi \rangle$$

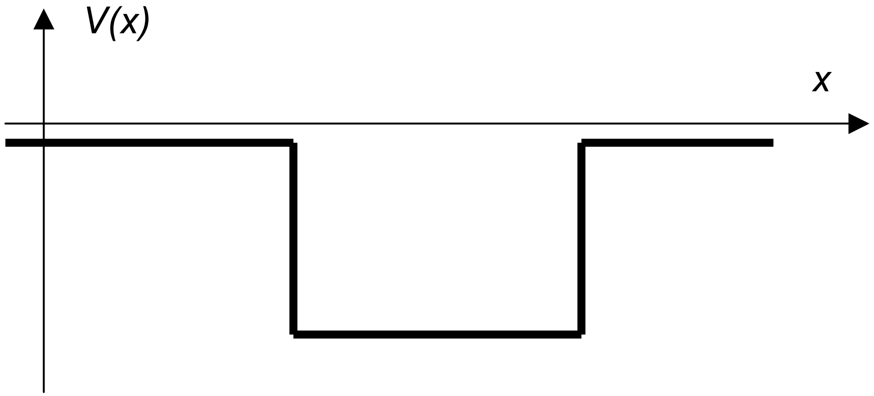
Si la valeur propre est dégénérée, cette formule se complique un peu :

$P(a_\alpha) = \left| \hat{P}_\alpha | \psi \rangle \right|^2$ où $\hat{P}_\alpha$ est le projecteur sur le sous-espace propre de a_α

UN EXEMPLE CONCRET : ENERGIE D'UN ELECTRON DANS UN PUITS QUANTIQUE



Potentiel électrostatique vu par un électron de conduction



Sandwich de Al Ga As – Ga As – Al Ga As

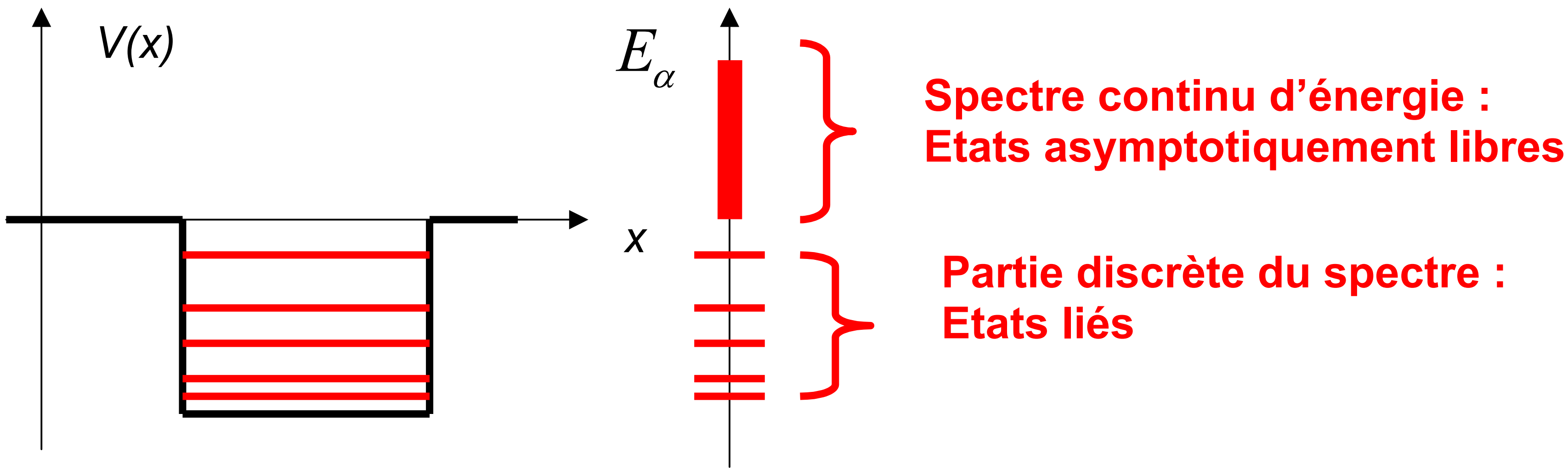
L'observable (particulièrement importante) associée à l'énergie est l'Hamiltonien.

Pour une particule ponctuelle à 1D : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V\left(\hat{x}\right)$ avec $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

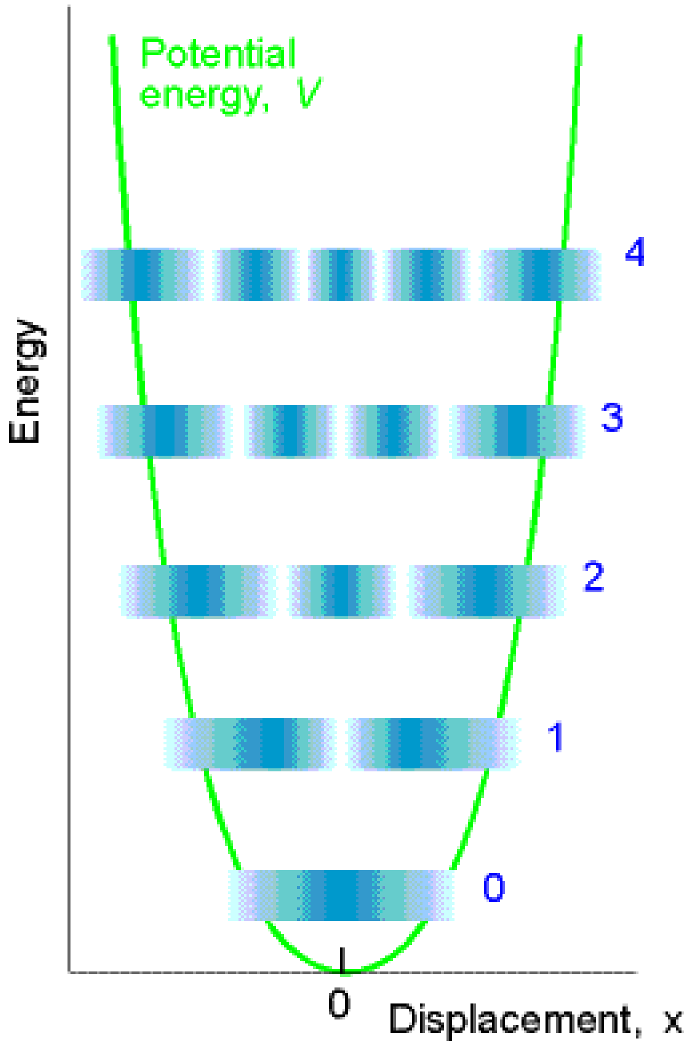
LE PUITS QUANTIQUE (suite)

Une mesure de l'énergie de l'électron ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres E_α de l'Hamiltonien :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''_\alpha(x) + V(x)\psi_\alpha(x) = E_\alpha\psi_\alpha(x)$$



UN AUTRE EXEMPLE CONCRET : L'OSCILLATEUR HARMONIQUE



$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$$

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

Etat fondamental (*n=0*) : fonction d'onde gaussienne

$$\psi_0(x) \propto \exp\left(-\frac{x^2}{2\alpha^2} \right) \text{ avec } \alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

NOTATIONS DE DIRAC : EN RESUME...

• L'état d'une particule est défini par la donnée de sa fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r})$ appartenant à l'espace **L**2 des fonctions de carré sommable.

On définit, par **isomorphisme**, l'espace vectoriel des états, **E** tel qu'à toute fonction $\Psi \in \mathbf{L}^2$ correspond un vecteur "**ket**" $|\Psi\rangle \in \mathbf{E}$.

• L'état d'une particule sera donc défini par la donnée d'un ket $|\Psi\rangle$.

Soit $\langle\Psi|$ le vecteur de **E***, espace dual de **E**. On appellera "**bra**" ce vecteur.

On munit l'espace vectoriel **E** du **produit scalaire** $\langle\Phi|\Psi\rangle$ défini par :

$$\boxed{\langle\Phi|\Psi\rangle = \int \Phi^*(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})\, d^3\mathbf{r}}$$

• L'espace **E** ainsi construit a donc la structure d'un espace de Banach (encore appelé pré-Hilbertien). Si de plus on munit cet espace d'une **base orthonormée complète**, **E** est alors un espace de Banach complet ou **espace de Hilbert**.

• Les vecteurs de base vérifient une **relation d'orthonormalité** et une **relation de fermeture** (traduisant le caractère complet de la base choisie dans **E**).

• Si les vecteurs de base sont repérés par des indices discrets (on parlera alors de "base discrète"), ces deux relations s'écrivent :

$\boxed{\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}}$ où δ_{ij} est le symbole de Kroneker

$\boxed{\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbf{1}}$ où **1** est l'opérateur identité

• Si les vecteurs de base sont repérés par des **indices continus** (on parlera alors de "base continue"), ces deux relations s'écrivent :

$\boxed{\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)}$ où δ est une distribution de Dirac

$$\boxed{\int d\alpha\, |u_\alpha\rangle\langle u_\alpha| = \mathbf{1}}$$

NOTATIONS DE DIRAC : EN RESUME...(suite)

On notera respectivement ces deux types de base : $\{|u_i\rangle\}$et$\{|u_\alpha\rangle\}$.

↳**CHOIX DE DEUX BASES CONTINUES DANS L'ESPACE L^2 DES FONCTIONS D'ONDES**

On choisit l'ensemble des fonctions :

$$\boxed{\xi_{\mathbf{r}'}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \text{ et } v_{p'}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'.\mathbf{r}\right)}$$

($v_{p'}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}'.\mathbf{r}\right)$ est l'ensemble des ondes planes où $(2\pi\hbar)^{3/2}$ est un facteur de normalisation rendant "symétriques" les expressions d'une transformée de Fourier et de son inverse.

Par isomorphisme, il correspond respectivement dans **E**, deux bases notées $\boxed{\{|r'\rangle\} \text{ et } \{|p'\rangle\}.}$

Suivant la base utilisée on parlera de **représentation** $\{|\mathbf{r}'\rangle\}$ ou de **représentation** $\{|\mathbf{p}'\rangle\}$.

On rappelle que δ désigne la distribution de Dirac, c'est-à-dire la « fonction généralisée » définie par : $\delta(x) = 0 \text{ pour } x \neq 0 \text{ et } \delta(0) = +\infty$ *et plus précisément, telle que l'on ait :* $\int_a^b \delta(x) f(x)\,dx = f(0)$

pour tout intervalle $]a,b[$ *contenant 0, et toute fonction* f *continue sur* $[a,b]$.

LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

POSTULAT I

A un instant t_0 fixé, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un ket $|\psi(t_0)\rangle$ appartenant à l'espace des états **E**.

POSTULAT II

Toute grandeur physique mesurable A est décrite par un opérateur **hermitique A** agissant dans **E**. Cet opérateur est une observable.

POSTULAT III

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

POSTULAT IV

- **cas d'un spectre discret non dégénéré :**

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\psi\rangle$ normé, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre non-dégénérée a_n de l'observable **A** correspondante est

$$\boxed{P(a_n) = |\langle u_n | \psi\rangle|^2}$$

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

LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE (suite)

- **cas d'un spectre discret dégénéré :**

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

$$P(a_n) = \sum_i \left|\langle u_n^i | \psi \rangle\right|^2$$

où $i = 1,2.....g_n$, g_n étant le degré de dégénérescence de a_n et $\left\{|u_n^i\rangle\right\}$ un système orthonormé de vecteurs formant une base dans le sous-espace propre $\mathbf{E_n}$ associé à la valeur propre a_n de **A**.

- **cas d'un spectre continu et non-dégénéré :**

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

$$\boxed{dP(a) = \left|\langle v_a | \psi \rangle\right|^2 da}$$

où $|v_a\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre *a* de l'observable **A** associée à A.

LES POSTULATS DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE (suite)

POSTULAT V

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

$$\boxed{\frac{\mathbf{P}_n|\psi\rangle}{\langle\psi|\mathbf{P}_n|\psi\rangle^{1/2}}}$$

POSTULAT VI

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

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

où **H**(t) est l'observable associée à l'énergie totale du système.

A la position r(x,y,z) de la particule est associée l'observable R(X,Y,Z) ; à l'impulsion p(p_x,p_y,p_z) de la particule est associée l'observable P(P_x,P_y,P_z).
L'observable A qui décrit une grandeur physique A définie classiquement s'obtient en remplaçant dans l'expression ***convenablement symétrisée*** *de A, r et p par les observables R et P respectivement.*