

Sommaire

CHAPITRE1: ORIGINES DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE -----	4
I. Rayonnement du corps noir -----	5
1. Définition -----	5
2. Expérience et interprétation classique -----	5
a-Expérience.-----	5
b-Interprétation classique -----	7
3. Loi de Planck-----	8
II. Effet photoélectrique découvert par Hertz et Stoletov 1887. -----	11
1. Expérience (Millikan 1916). -----	11
2. Interprétation quantique : -----	13
III. Spectres atomiques. -----	15
1. Introduction.-----	15
2. Spectres de raies. -----	15
3. lois empiriques.-----	15
4-Interprétation des spectres de raies. -----	16
a-Modèle de Thomson(1902).-----	16
b- modèle planétaire de Rutherford (1909). -----	16
c- modèle de Bohr (1913) voir TD. -----	17
5- illustration des séries spectrales : -----	19
CHAPITRE 2 DUALITE ONDE-CORPUSCULE-----	20
I. Cas de la lumière -----	21
1. Aspect ondulatoire-----	21
2. Aspect corpusculaire : effet Compton. -----	22
a, Expérience. -----	22
b. Interprétation (voir TD). -----	23
3. Dualité onde corpuscule -----	24
a. Unification quantique des deux aspects. -----	24
b- Conclusion-----	25
II. Cas de la matière.-----	25
1. Onde de De Broglie -----	25
2- Confirmation expérimentale de l'hypothèse de De Broglie -----	26
3. Fonction d'onde d'une particule matérielle -----	28
4. Equation d'onde -----	28
III. Le paquet d'ondes -----	30
IV. Vitesse de phase et vitesse de groupe-----	31
1. Vitesse de phase : -----	31
2. Vitesse de groupe -----	31
V. Relations d'incertitude de Heisenberg -----	31
CHAPITRE 3: PARTICULE DANS UN POTENTIEL STATIONNAIRE -----	32

I. Résolution de l'équation de Schrödinger.	32
1. Méthode de séparation des variables.	32
2. Modélisation de potentiels réels	33
II. Marche de potentiel	34
1. Cas où $E > V_0$	35
a. Etude classique	35
b. Etude quantique	35
2. Cas où $E < V_0$	38
a. étude classique :	38
b. étude quantique :	38
III. Barrière de potentiel	39
1. Cas où $E < V_0$: Effet Tunnel	40
2. Cas où $E > V_0$: Transfert résonnant	41
IV. Puits de potentiel (TD)	42
CHAPITRE 4 FORMALISME MATHEMATIQUE DE LA MECANIQUE QUANTIQUE	43

I. Espace des fonctions d'onde d'une particule	43
1. définition	43
2-Structure de l'espace ξ des fonctions d'onde	43
a. ξ est un espace vectoriel	43
b. Produit scalaire	43
3- Bases orthonormées complète discrètes dans ξ	44
a. définition :	44
b-relation de fermeture :	45
4. Base orthonormée complète continue de ξ .	45
a. Définition	45
b - Composantes d'une fonction d'onde ψx	45
c. Exemples de fonctions $v_\alpha(x)$	46
II. -Espace des états - Notations de Dirac	49
1. Définition	49
2.Vecteurs "kets" et vecteurs "bras"	49
3-Correspondance entre kets et bras	49
III. Opérateurs linéaires	50
1. Définition	50
2. Produit de deux opérateurs Commutateur	50
3. Représentation d'un opérateur par une matrice	51
4.Exemple d'opérateur linéaire: Le projecteur (voir TD).	51
IV. Opérateurs adjoints	52
1. définitions	52
2. Propriétés	52
3. Règles de conjugaison.	52
V. Opérateurs hermétiques	53
VI. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur	53
1. Définition	53

2. Remarques :	53
3. Equation caractéristique	54
4. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur hermitique	54
VII. Observables	56
1. Définition	56
2. Observables qui commutent	56
3. Ensemble complet d'observables qui commutent	56
CHAPITRE 5: POSTULATS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE	58
I. Etat d'un système, Premier postulat :	59
II -Description d'une grandeur physique, Deuxième postulat.	60
III- Mesure d'une grandeur physique, Troisième postulat :	60
1- Résultat de la mesure.	60
2- Prédiction de la mesure	60
a- Spectre discret non dégénéré.....	61
b- Spectre discret dégénéré.	61
c- Spectre continu non dégénéré.	62
IV- Réduction du paquet d'ondes.....	62
V- Evolution dans le temps ,Quatrième postulat.	63
VI- Quantification des grandeurs physiques, Cinquième postulat :	63
CHAPITRE 6: OSCILLATEUR HARMONIQUE	65
I. L'oscillateur harmonique en mécanique classique.....	65
II. L'oscillateur harmonique en mécanique quantique :.....	66
III-Valeurs propres de H	67
1. Valeurs propres de N.....	69
a. Propriétés des valeurs propres et des vecteurs propres de N.....	69
b. Spectre de N	70
2. Interprétation des opérateurs a et a^+	70
IV. Etats propres de H.....	71
V. Fonctions propres de H	73
1.Fonction d'onde de l'état fondamental.....	73
2. Fonctions d'onde associés aux autres états $ \varphi_n\rangle$	74

CHAPITRE1: ORIGINES DE LA PHYSIQUE QUANTIQUE

A la fin du dix-neuvième siècle, les objets physiques qui constituent l'univers étaient classés en deux catégories, la matière et le rayonnement.

- La matière est faite de corpuscules parfaitement localisables dont le mouvement peut être décrit par la mécanique de Newton. Les grandeurs physiques associées à ces corpuscules s'expriment en fonction des composantes de la position et de l'impulsion qui sont les variables dynamiques fondamentales.
- Le rayonnement est gouverné par les lois de l'électromagnétisme de Maxwell. Ses variables dynamiques sont les composantes en chaque point de l'espace des champs électrique et magnétique.

Le succès de la physique était à cette époque impressionnant et tous les phénomènes connus trouvaient leur explication dans le cadre de ce programme classique.

A l'aube du vingtième siècle et avec l'essor des progrès technologiques, les physiciens se trouvèrent tout à coup confrontés à des phénomènes nouveaux pour lesquels les prévisions de la théorie classique sont en désaccord flagrant avec l'expérience. Il fallait donc une nouvelle théorie susceptible de pallier les insuffisances de la conception classique.

Les phénomènes qui furent sans doute historiquement à l'origine de la naissance de la nouvelle théorie sont le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique et les spectres atomiques.

I. Rayonnement du corps noir

1. Définition

Un corps noir est un corps qui absorbe intégralement tout rayonnement frappant sa surface.

Un rayon lumineux atteignant la surface d'une enceinte fermée dont le revêtement intérieur absorbe et diffuse la lumière qu'il reçoit, pénètre dans cette enceinte et y subit une suite de réflexions plus ou moins diffusantes telles qu'une très faible fraction de l'énergie lumineuse incidente puisse ressortir vers l'extérieur par un petit orifice, on dit que le corps noir se comporte donc comme un absorbant parfait. Ce qui sort de trou est le rayonnement de corps noir (RCN)

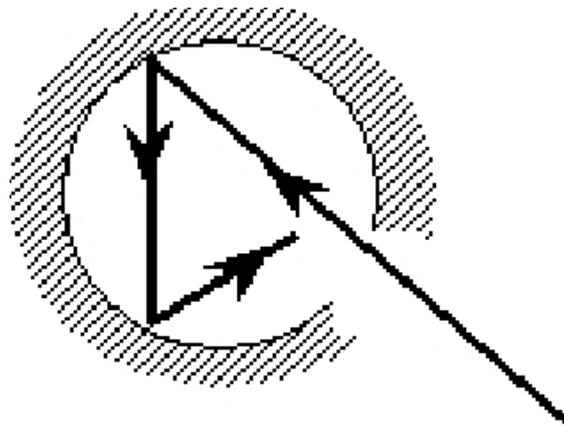


Figure 1 réalisation pratique d'un corps noir.

Remarque : le terme noir ne veut pas dire que sa couleur est noire

2. Expérience et interprétation classique

a-Expérience.

Si on chauffe un corps à haute température, il émet de la lumière à toutes les longueurs d'onde. Un four ou une lampe à incandescence par exemple à 600°C, il est rouge sombre, à 1200°C sa couleur devient plus claire et plus vive, à 2500°C il émet une lumière blanche intense.

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

Si l'on porte en fonction de la longueur d'onde, la densité d'énergie (figure 2), on obtient une courbe régulière tendant vers zéro pour les grandes et pour les faibles longueurs d'onde et présentant un maximum pour une longueur d'onde λ_M dépendant simplement de la température suivant la loi dite de "déplacement de Wien" (1896).

$$\lambda_M T = C_0 = 0.2898 \text{ cm.K}$$

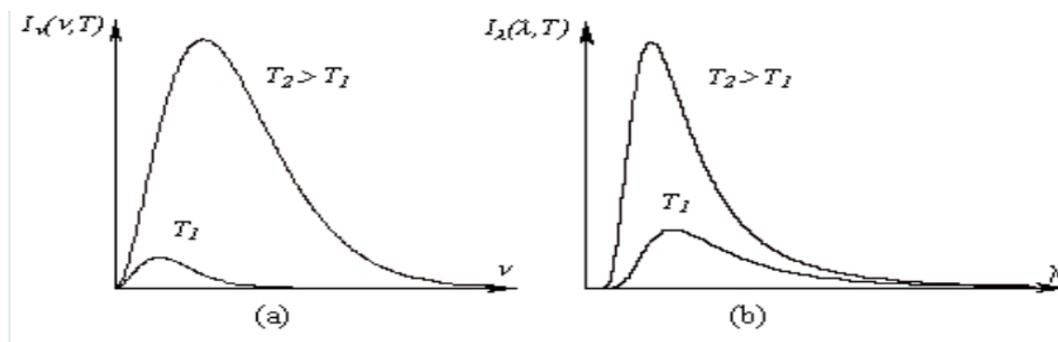
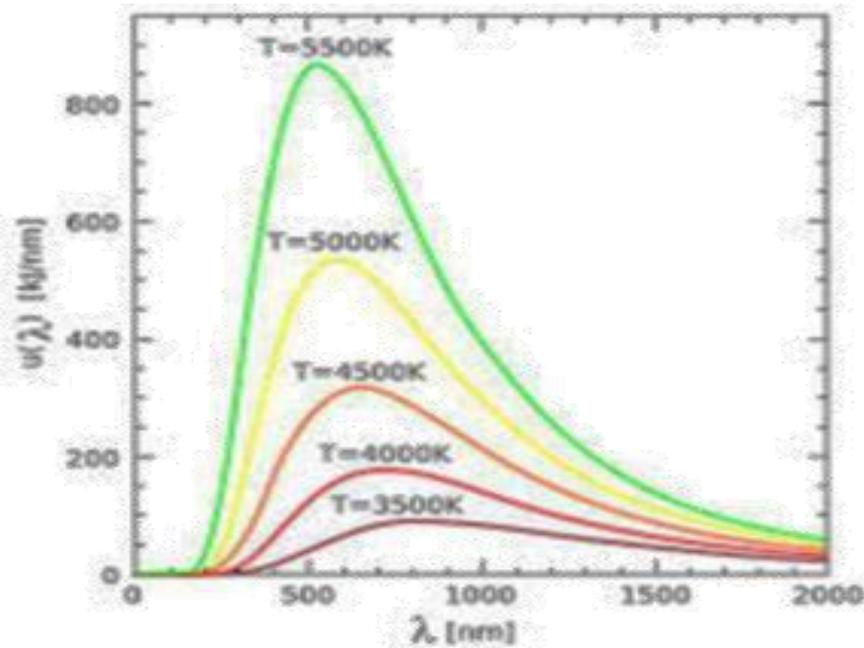


Figure 2 : Densité d'énergie rayonnée par le corps noir pour différentes températures : (a) en fonction de la fréquence, (b) en fonction de la longueur d'onde

Remarques: Le rayonnement de corps noir est caractérisé par deux propriétés importantes :

- Quand la température d'un corps noir augmente, l'intensité de rayonnement émis par le corps noir augmente.
- Le maximum de la distribution de rayonnement de corps noir se déplace vers une longueur d'onde petite



b-Interprétation classique

Pour expliquer ces résultats, Rayleigh et Jeans, utilisant la théorie électromagnétique et la mécanique statistique, proposèrent que “le champ électromagnétique rayonné est dû à un ensemble dénombrable d’oscillateurs harmoniques linéaires qui vibrent”.

La densité d’énergie rayonnée est alors donnée par :

$$I_\nu(\nu, T) = \rho(\nu)\langle E(\nu, T) \rangle \quad (1)$$

où $\rho(\nu)$ représente le nombre d’oscillateurs par unité de volume et $\langle E(\nu, T) \rangle$ l’énergie moyenne de chaque oscillateur. Ces deux grandeurs sont calculables par la mécanique statistique et valent respectivement

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

$$\langle E(\nu, T) \rangle = kT \quad (3)$$

On aboutit ainsi à la loi de Rayleigh-Jeans

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (4)$$

La théorie de R-J n'est en accord avec l'expérience que pour les faibles fréquences (figure 3). Pour les hautes fréquences, $I_\nu(\nu, T)$ diverge, ce qui conduirait à une énergie rayonnée infinie, c'est "la catastrophe de l'ultraviolet".

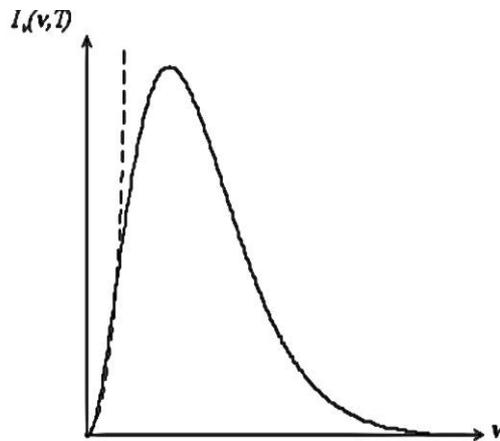


Figure 3 Catastrophe ultraviolet

3. Loi de Planck

Pour obtenir un accord avec les observations expérimentales, Planck a été amené à s'écarter de la mécanique statistique et à évaluer de façon différente l'énergie moyenne de chaque oscillateur. Le 14 Décembre 1900, il émit l'idée que :

“Les échanges d'énergie entre la matière (atomes qui sont des oscillateurs) et le rayonnement ne se font pas de façon continue mais par quantités discrètes et indivisibles.”

Plus précisément, l'énergie de chaque oscillateur est un multiple entier d'une valeur donnée ε soit :

$$E_n = n\varepsilon \quad (5)$$

Dans ce cas, la moyenne de $E(\nu, T)$ est donnée simplement par :

$$\langle E(\nu, T) \rangle = \frac{\varepsilon}{e^{\frac{\varepsilon}{kT}} - 1} \quad (6)$$

Et donc on a

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{\varepsilon}{e^{\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)} - 1} \quad (7)$$

Pour que cette relation soit en accord avec l'expérience c'est à dire pour que l'on ait $\lim_{\nu \rightarrow \infty} I_\nu(\nu, T) = 0$, il faut que ε soit une fonction croissante de ν . Planck a posé $\varepsilon = h\nu$ où h est une nouvelle constante universelle appelée "constante de Planck". Il s'ensuit alors que :

"Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement se font par quantités discrètes et indivisibles d'énergie $h\nu$ appelées quanta."

Quanta étant le pluriel latin de quantum, qui signifie "quantité."

La loi de Planck s'écrit alors dans toute sa gloire sous la forme :

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} - 1} \quad (8)$$

La recherche du maximum de $I_\nu(\nu, T)$ en fonction de ν permet, en utilisant la loi empirique de Wien, de déterminer la valeur de la constante de Planck qu'on trouve égale à :

$$h = 6,64 \cdot 10^{-34} \text{ J.s.}$$

On remarque qu'aux basses fréquences la loi de Planck redonne bien la loi de Rayleigh-Jeans et qu'aux hautes fréquences, on retrouve la décroissance exponentielle observée expérimentalement, en effet

$$\text{Si } \frac{h\nu}{kT} \ll 1, \text{ alors } e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} = 1 + \frac{h\nu}{kT}$$

$$\text{D'où } \langle E(\nu, T) \rangle \approx kT$$

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT \quad (9)$$

$$\text{Si } \frac{h\nu}{kT} \gg 1 \text{ alors } e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)} \gg 1$$

On a donc

$$\langle E(\nu, T) \rangle \approx h\nu e^{-\left(\frac{h\nu}{kT}\right)}$$

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\left(\frac{h\nu}{kT}\right)}} \quad (10)$$

La loi de Planck peut s'exprimer également en fonction de la longueur d'onde. Elle s'écrit alors :

$$I_\lambda(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad (11)$$

Cette expression est représentée par la courbe en traits pleins de la figure 4 et elle est en accord parfait avec l'expérience.

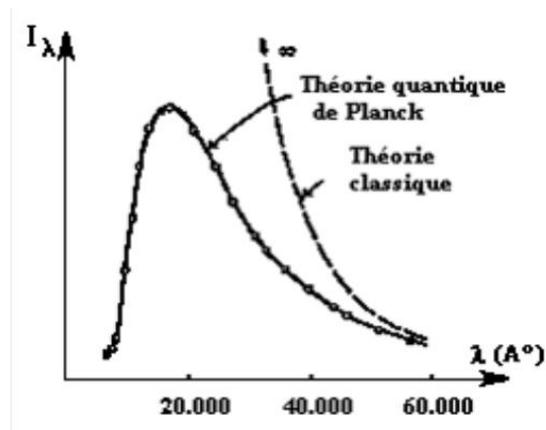


Figure 4: Confrontation des théories classique et quantique du rayonnement du corps noir avec l'expérience

La puissance totale émise par le corps noir est donnée par

$$P = \frac{c}{4} \int_0^\infty I_\lambda(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4 \quad (12)$$

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ S.I}$$

Cette loi est connue sous le nom de "loi de Stefan" et σ est la constante de Stefan.

II. Effet photoélectrique découvert par Hertz et Stoletov 1887.

Il était expérimentalement connu que lorsque de la lumière (visible ou ultraviolette) tombe sur une surface métallique, des électrons sont éjectés par cette surface. Ce phénomène peut être prévisible par la théorie classique : la lumière étant une onde électromagnétique, le champ électrique qui lui est associé peut induire une force qui s'exerce sur les électrons de la surface métallique et éjecter certains d'entre eux.

1. Expérience (Millikan 1916).

On dispose dans une cellule transparente à la lumière ultraviolette et où règne un vide poussé, deux plaques. L'une est appelée cathode (C)(-), et est constituée, en général, par un métal alcalin, l'autre est métallique, et est appelée anode (A) (+). Ces deux plaques sont reliées aux bornes d'un générateur, de sorte à établir une tension U_{AC} entre elles.

Lorsqu'on éclaire la cathode par une radiation monochromatique, un courant d'intensité I peut traverser le circuit.

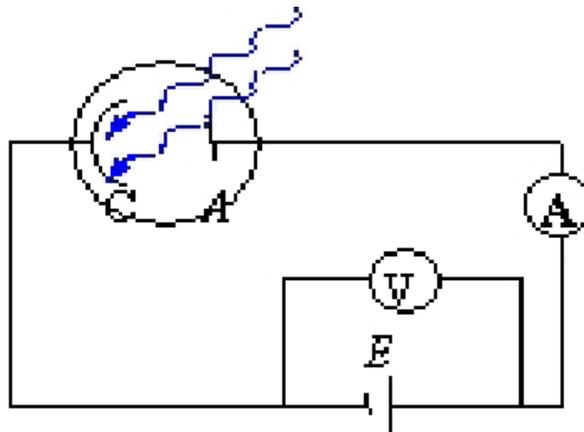


Figure 5

On constate que :

* Ce courant ne s'observe que si les radiations ont une fréquence supérieure à une certaine valeur ν_0 appelée «seuil de fréquence de la cathode». Le tableau suivant donne le Seuil photoélectrique pour différents métaux.

Métal	Pt	Ag	Cu	Zn	Ba	Na	K	Cs
$\nu_0 \times 10^{14} \text{Hz}$	15,8	11,1	10,3	8,1	6,0	5,8	5,6	4,6
$\lambda_0(\mu\text{m})$	0,19	0,27	0,29	0,37	0,50	0,52	0,54	0,65

* Lorsque la tension U_{AC} augmente, l'intensité du courant augmente et tend vers une limite appelée "intensité de saturation". Cette limite augmente avec la puissance du faisceau lumineux incident (figure 6).

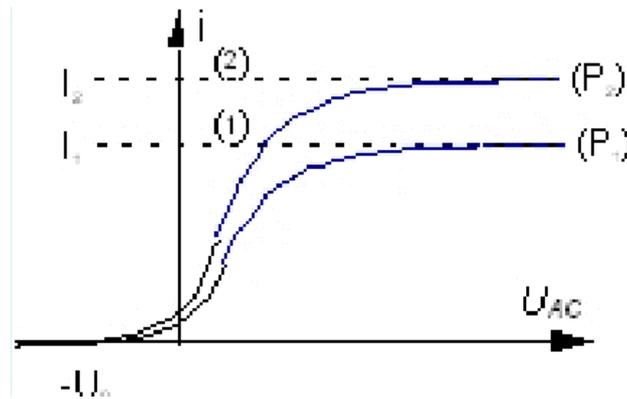


Figure 6

* Lorsque la tension U_{AC} est nulle, un courant I_0 traverse encore le circuit.

* Le courant s'annule pour une tension $U_{AC} = -U_a$, U_a est appelée "potentiel d'arrêt"

Le potentiel d'arrêt U_a dépend de la fréquence : il est nul pour $\nu < \nu_0$ et croît linéairement avec ν pour $\nu > \nu_0$ (figure7).

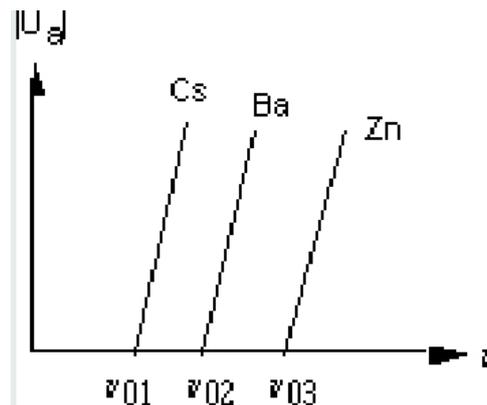


Figure 7

L'intensité de saturation et le potentiel d'arrêt peuvent s'expliquer aisément (facilement). En effet, lorsque U_{AC} est positive, les électrons émis par la cathode

sont accélères par le champ électrique existant entre A(+) et C(-) et se dirigent vers l'anode, donnant ainsi naissance à un courant dans le circuit extérieur.

Lorsque U_{AC} est négative, les électrons sont freinés par le champ électrique et selon leur vitesse d'émission, certains d'entre eux peuvent atteindre l'anode, alors que d'autres retournent vers la cathode.

On peut calculer la valeur du potentiel d'arrêt en appliquant le théorème de l'énergie cinétique à un électron de masse m se déplaçant de C vers A avec la vitesse V

$$\frac{1}{2}mV_A^2 - \frac{1}{2}mV^2 = eU_{AC} \quad (12)$$

Si le courant I est nul, aucun électron n'atteint l'anode et $V_A=0$, soit

$$\frac{1}{2}mV^2 = -eU_{AC} = eU_a \quad (13)$$

L'énergie cinétique des électrons est donc comme U_a . Elle est nulle pour $v < v_0$ et croit linéairement lorsque $v > v_0$.

$$\frac{1}{2e}mV^2 = U_a \quad (14)$$

La dépendance simple de l'énergie cinétique des électrons en fonction de la fréquence et son indépendance de la puissance du faisceau incident ne trouve pas d'explication dans le cadre de la théorie classique.

2. Interprétation quantique :

L'explication de ces phénomènes fut donnée par Einstein en 1905. Il nota que la loi de Planck pouvait être comprise en considérant que le champ électromagnétique consiste en de véritables corpuscules d'énergie lumineuse $h\nu$ (les quanta de lumière ou photons) : dans ce cas, le quantum d'énergie peut être transmis en totalité à un électron. Cet électron acquiert l'énergie $E=h\nu$ au moment où il est encore dans le métal : si on suppose qu'il est nécessaire

d'effectuer un certain travail W pour l'extraire du métal, cet électron sera donc émis avec l'énergie cinétique E_c : l'énergie $h\nu$ se divise en deux parties :

L'une pour extraire l'électron et l'autre pour son déplacement.

$$E_c = E - W \quad (15)$$

Soit donc :

$$E_c = h\nu - W \quad (16)$$

W est une constante caractéristique du métal, indépendante de ν et appelée "travail d'extraction".

Comme l'énergie cinétique E_c est positive ou nulle, on a nécessairement :

$h\nu - W \geq 0$, soit

$$\nu \geq \frac{W}{h} = \nu_s \quad (17)$$

Le courant ne s'observe donc que pour des fréquences supérieures à la fréquence seuil ν_s .

On obtient une valeur de h qui coïncide exactement avec la constante de Planck.

On remarque aussi que l'énergie cinétique des électrons varie linéairement avec la fréquence et est indépendante de l'intensité de la lumière, ce qui est conforme à l'expérience.

Cette loi rend donc directement compte des aspects "non classiques" de l'effet photoélectrique. Elle fournit de plus, une valeur expérimentale de h à partir de la variation du potentiel d'arrêt avec la fréquence (figure8). On a en

$$\frac{1}{2}mV^2 = eU_a = h\nu - W \quad (18)$$

$$U_a = \left(\frac{h}{e}\right)\nu - \frac{W}{e} \quad (19)$$

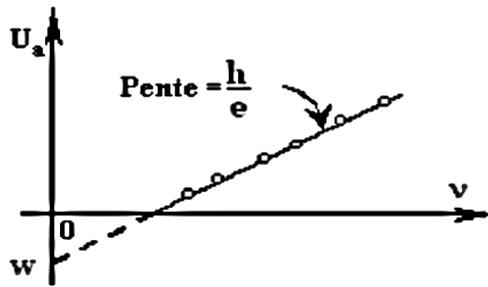


Figure 8 Variation du potentiel d'arrêt U_a en fonction de la fréquence ν

III. Spectres atomiques.

1. Introduction.

Vers la fin de 19^{ème} siècle, les spectres atomiques qui étaient un autre problème très connu a aussi conduit à des développements considérables de la théorie des quanta. En effet, lorsqu'un atome est excité ou irradié, il n'émet ou n'absorbe de la lumière que seulement pour certaines valeurs discrètes de fréquences bien déterminées.

2. Spectres de raies.

On appelle spectre d'un rayonnement la répartition des intensités monochromatiques en fonction de la longueur d'onde ou la fréquence.

Le spectre des raies d'émission ou d'absorption d'un atome est le spectre de radiations discrètes émises ou absorbées par cet atome.

3. lois empiriques.

Les expériences ont montré que les raies d'émission de l'atome d'hydrogène sont réparties en fonction de la longueur d'onde en séries bien déterminées appelées séries spectrales : séries de Lyman, de Balmer, de Pashen..., qui sont données par la loi empirique de Ritz Balmer- Rydberg :

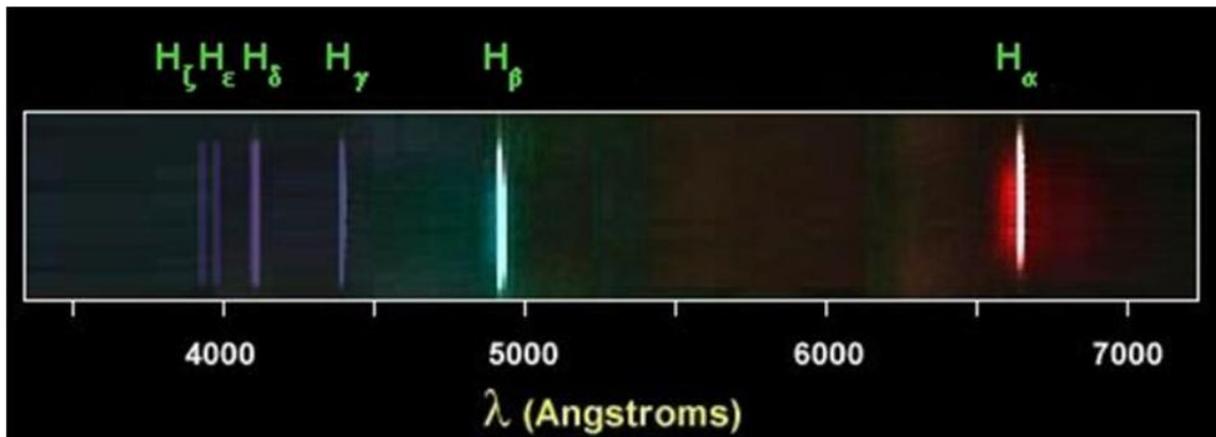
$$\nu_{nm} = \frac{c}{\lambda_{nm}} = cR_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (20)$$

($n, m=1, 2, \dots$) et ($n < m$).

$R_H = 1.097373 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ est la constante de Rydberg.

Les séries de Balmer de l'atome de l'hydrogène sont données par la loi empirique de Balmer –Rydberg suivante :

$$\nu_{2n} = \frac{c}{\lambda_{2n}} = cR_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (21)$$



4-Interprétation des spectres de raies.

Les spectres de raies (d'émission ou absorption) caractérisent chaque élément atomique et indiquent une identité de nature discrète dans les atomes. Cette discontinuité ne trouvait pas d'explication dans le cadre de la mécanique classique.

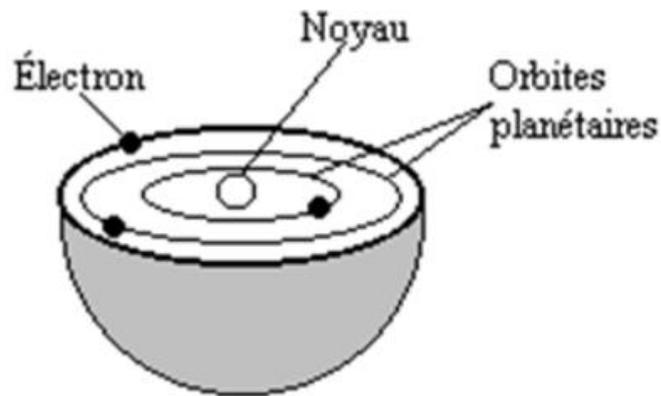
Pour interpréter ces résultats expérimentaux, plusieurs modèles ont été proposés.

a-Modèle de Thomson(1902).

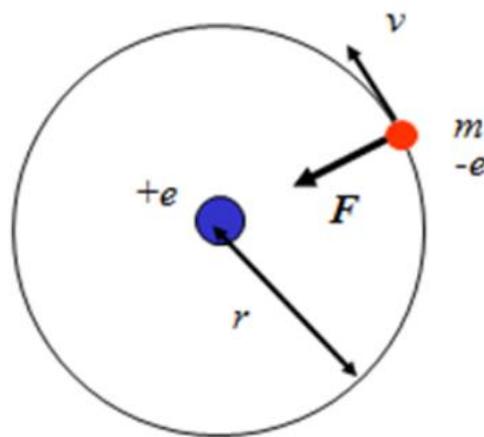
Dans ce modèle, l'atome est considéré comme une sphère remplie d'une substance électriquement positive et fourré d'électrons négatifs immobiles.

b- modèle planétaire de Rutherford (1909).

Dans ce modèle, les électrons de charge négative tournent autour du noyau de charge positive.



c- modèle de Bohr (1913) voir TD.



-Premier postulat : quantification de moment cinétique

Le moment cinétique de l'électron, en mouvement sur son orbite autour du noyau, ne peut prendre comme valeurs que des multiples entiers n de \hbar .

Ces orbites ainsi définies sont appelées orbites stationnaires qui sont les seules compatibles avec la stabilité de l'atome.

$$\sigma = mvr = n\hbar \quad (22)$$

V est la vitesse de l'électron sur son orbite, m est sa masse et r est le rayon de l'orbite.

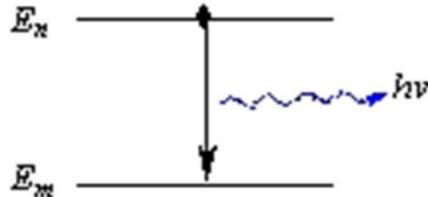
-Deuxième postulat : règles des quanta de Bohr.

A chaque orbite permise d'ordre n correspond un niveau d'énergie E_n .

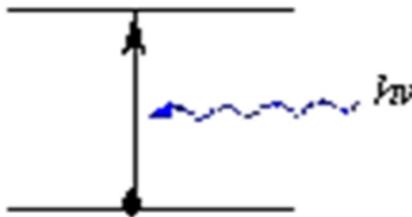
Les transitions des électrons se font par sauts.

Un électron passe d'orbite d'énergie E_n vers une orbite d'énergie E_m plus petite (plus grande) par émission (absorption) d'un photon d'énergie :

$$E = h\nu_{nm} = E_n - E_m$$



Emission



Absorption

Figure 9 : Emission et absorption d'un photon par un atome

Conclusions

Grace au modèle de Bohr basé sur la quantification des énergies atomiques et du moment cinétique des orbites électroniques, on a pu interpréter les spectres de raies de l'atome d'hydrogène et on a pu déterminer :

-Les rayons des orbites quantifiées de Bohr :

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} n^2 \quad (23)$$

-les énergies quantifiées des états stationnaires :

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \quad (24)$$

E_n est en (eV).

-Les séries de Lyman, de Balmer et de Paschen ont été bien reproduites.

-une bonne valeur théorique de la constante de Rydberg a été également trouvée :

$$R_h = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} \quad (25)$$

5- illustration des séries spectrales :

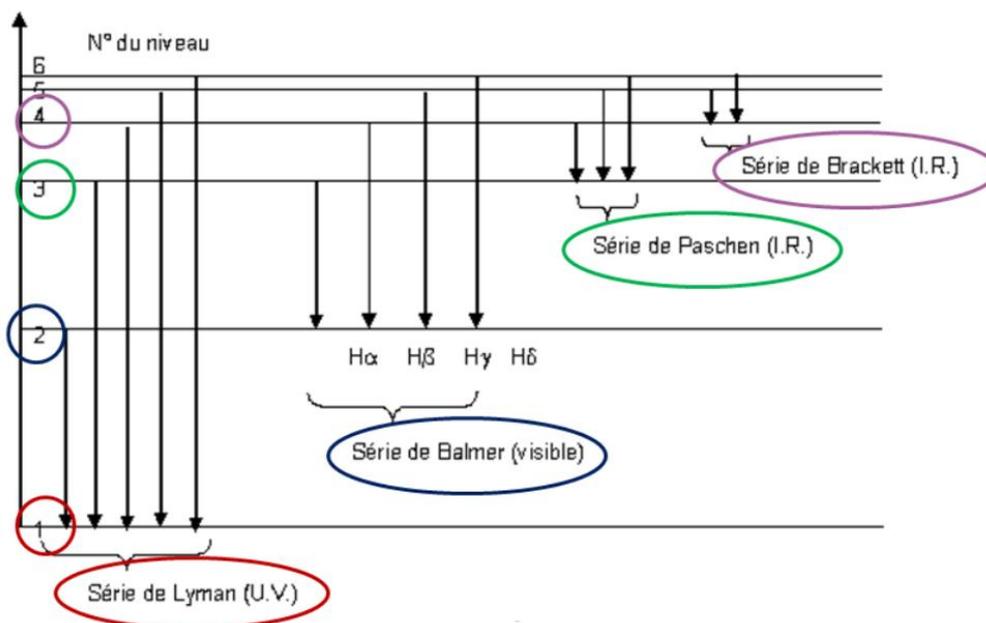


Figure 10 : Spectre de l'atome d'hydrogène

Remarque.

Le modèle de Bohr s'applique seulement à l'atome de l'hydrogène (où systèmes hydrogénoïde) tels que He⁺. Il ne peut pas expliquer le spectre des atomes complexes. Il n'explique pas de même pourquoi certaines raies sont plus intenses que d'autres...

CHAPITRE 2 DUALITE ONDE-CORPUSCULE

Les études menées sur la nature de la lumière montrent que suivant les conditions de l'expérience réalisée, la lumière peut être décrite soit par une onde électromagnétique soit par une assemblée de corpuscules : les photons.

L'aspect ondulatoire de la lumière se manifeste par des phénomènes d'interférences et de diffraction tandis que l'aspect corpusculaire apparaît relativement dans l'effet photoélectrique.

Dans le cas de la lumière, on peut donc dire qu'il y a une dualité onde corpuscule bien établie.

Pour les particules matérielles les choses ne semblent pas à priori aussi évidentes : en effet, toute particule est un corpuscule et se manifeste donc comme telle, alors qu'une manifestation ondulatoire d'un corpuscule n'est pas une réalité physique concrète.

C'est à Louis Victor De Broglie qu'on doit l'association des propriétés ondulatoires aux corpuscules : ce qui est vrai pour les photons devrait l'être pour tout type de particule, c'est à dire que la matière doit posséder comme la lumière la double entité ondulatoire et corpusculaire.

La physique moderne devra donc rendre compte de deux aspects différents du même objet pour ne pas se heurter aux difficultés rencontrées par la physique classique qui est intégrée dans un schéma figé à deux objets distincts : L'onde et le corpuscule.

Nous allons montrer dans ce chapitre que lumière et matière ont la double entité ondulatoire et corpusculaire et que ces deux aspects sont complémentaires.

I. Cas de la lumière

1. Aspect ondulatoire

L'aspect ondulatoire de la lumière est révélé par l'existence des phénomènes de diffraction et d'interférences. De tels phénomènes se retrouvent d'ailleurs dans de nombreux domaines de la physique (mécanique, acoustique,...) et trouvent une interprétation générale dans un même formalisme mathématique.

L'onde, qu'elle soit scalaire ou vectorielle est, avant tout, le déplacement à vitesse finie de la variation d'une grandeur physique. Pour l'onde lumineuse la grandeur qui se propage est la variation vectorielle du champ électrique ou magnétique. C'est essentiellement un processus de transport d'énergie :

L'énergie transportée est proportionnelle au carré de l'amplitude de l'onde.

L'onde est décrite par une fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ qui satisfait l'équation de propagation de la forme :

$$\Delta\Psi(\vec{r}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2\Psi(\vec{r}, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1)$$

Qu'est une équation différentielle aux dérivées partielles du second ordre. Δ est l'opérateur laplacien et V la vitesse de propagation de l'onde. Lorsque, à un instant t , la fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ a même valeur en tous les points d'un plan normal à une direction de propagation, l'onde est dite plane.

Si en plus, elle est une fonction périodique simple du temps, l'onde est dite plane et monochromatique et sa représentation la plus commode est donnée par :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2)$$

Ce formalisme permet de rendre compte convenablement des phénomènes d'interférences et de diffraction lumineuse.

Comme exemple : Expérience d'interférences des fentes d'Young. Dans cette expérience une lumière monochromatique émise par une source S tombe sur une plaque opaque percée de deux fentes fines F1 et F2 qui éclairent un écran d'observation E disposé à une grande distance D de la plaque P.

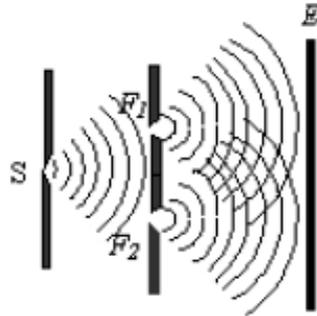


Figure 1 Expérience d'interférences des fentes d'Young

Dans ce cas les grandeurs physiques oscillantes sont les composantes du champ électrique ou magnétique, de sorte qu'on peut prendre pour fonction d'onde le vecteur champ :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (3)$$

2. Aspect corpusculaire : effet Compton.

L'effet photoélectrique montre seulement que l'échange d'énergie entre la lumière et la matière se fait par quantum d'énergie de valeur $h\nu$. Compton (1923) a montré que le photon un corpuscule individualisé.

a, Expérience.

Expérimentalement, on réalise la diffusion Compton en envoyant un faisceau de rayon X dont la longueur d'onde est de quelques angströms sur une substance contenant un certain nombre d'électrons libres (calcite, Aluminium,...).

Si la cible est assez mince, on observe, par transmission des rayons X diffusés en dehors de la direction incidente avec une longueur d'onde légèrement plus élevée c'est à dire une fréquence plus basse (figure 2):

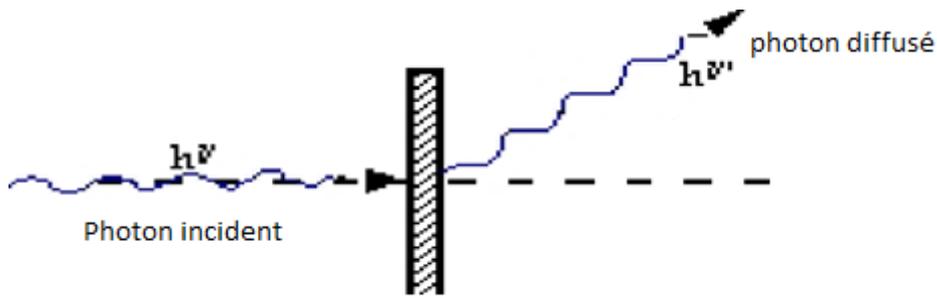


Figure 2 : Diffusion Compton

Compton a trouvé également que la longueur d'onde λ' des rayons diffusés est fonction de l'angle θ que font ces rayons avec la direction incidente. La relation entre λ', λ et θ étant

$$\lambda' = \lambda + A \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (4)$$

b. Interprétation (voir TD).

Pour expliquer ces résultats, Compton a supposé que les photons X sont des corpuscules qui entrent en collision avec les électrons de la cible. Dans une telle collision, il y a conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie. La théorie élémentaire des collisions peut donc fournir une interprétation même quantitative des résultats expérimentaux.

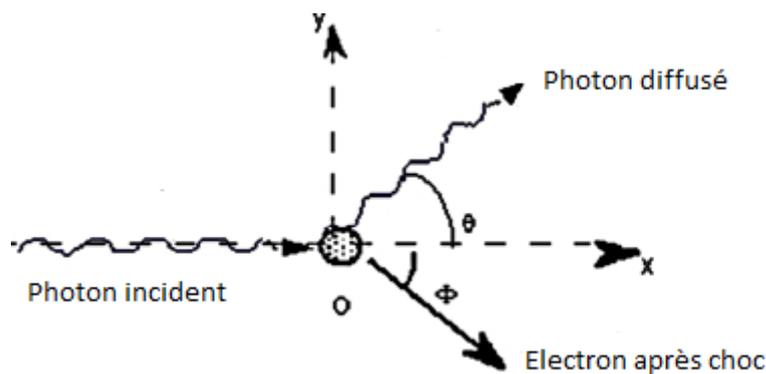


Figure 3 : Collision entre un photon et un électron libre au repos

Compton a montré que :

$$\lambda' - \lambda = \frac{2h}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (5)$$

Cette formule est exactement en accord avec des observations expérimentales.

Il est également possible de calculer l'angle φ et l'énergie cinétique de l'électron éjecté, on trouve

$$\coth \varphi = \left(1 + \frac{hv}{mc^2}\right) \operatorname{tg} \frac{\nu}{2} \quad (6)$$

$$E_c = \frac{2 \frac{hv}{mc^2} \cos^2 \varphi}{\left(1 + \frac{hv}{mc^2}\right)^2 - \left(\frac{hv}{mc^2}\right)^2 \cos^2 \varphi} hv \quad (7)$$

3. Dualité onde corpuscule

Nous avons vu que la lumière est formée d'une assemblée de photons qui se manifeste soit de manière ondulatoire soit de manière corpusculaire. Doit-on en conclure que la lumière ne peut se manifester que sous une forme ou sous une autre ?

a. Unification quantique des deux aspects.

Dans son interaction avec l'écran, la lumière manifeste son aspect corpusculaire, mais la répartition d'un grand nombre de ces corpuscules, c'est à dire leur comportement statistique est lié à l'onde électromagnétique. Cette onde permet de calculer la probabilité pour que le corpuscule se manifeste. On admettra alors l'hypothèse de Max Born (1924) selon laquelle :

-la fonction d'onde du photon est donnée par :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (8)$$

Elle caractérise entièrement son état à l'instant t et représente "l'amplitude de probabilité" de trouver le photon en un point \vec{r} à l'instant t.

-la densité de probabilité de trouver le photon au point \vec{r} à l'instant t est donnée par :

$$|\vec{E}(\vec{r}, t)|^2$$

b- Conclusion

- Les aspects corpusculaire et ondulatoire de la lumière sont inséparables. La lumière se comporte à la fois comme une onde et comme un flux de particules. L'onde permet de calculer la probabilité pour qu'un photon se manifeste.

-Les prévisions sur le comportement d'un photon ne peuvent être que de type probabiliste.

- Au concept classique de trajectoire, il faut substituer celui d'état. L'état quantique du photon est caractérisé par la fonction d'onde $\vec{E}(\vec{r}, t)$.

II. Cas de la matière.

La matière est formée d'un ensemble infini mais dénombrable de particules. L'aspect corpusculaire de ces particules (électrons, protons,...) est un fait acquis et l'étude de leur mouvement est décrite convenablement par les principes de la mécanique classique. Toutefois des difficultés sérieuses apparaissent à l'échelle atomique où on trouve que certaines grandeurs physiques comme l'énergie, le moment angulaire,... sont quantifiées. Un pas important est franchi lorsque Louis Victor de Broglie (1924) suggère théoriquement l'existence d'un aspect ondulatoire pour les particules matérielles.

1. Onde de De Broglie

D'après De Broglie, la matière comme la lumière doit posséder la double entité corpusculaire et ondulatoire : les relations d'Einstein valables pour le photon doivent l'être également pour la particule. Ainsi à une particule dont les grandeurs dynamiques sont l'énergie E et l'impulsion \vec{P} correspond une onde

plane de pulsation ω et de vecteur d'onde \vec{k} . De Broglie démontra de façon très séduisante que les couples (E, \vec{P}) et (ω, \vec{k}) sont reliés par :

$$E = \hbar\omega \quad (9)$$

$$\vec{P} = \hbar\vec{k} \quad (10)$$

Soit encore en module :

$$p = mV = \frac{h}{2\pi} \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{\lambda} \quad (11)$$

Ce qui donne pour la longueur d'onde :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (12)$$

Qui est la célèbre relation de De Broglie et qui exprime la longueur d'onde associée à une particule de masse m se déplaçant à la vitesse V .

Lorsque les particules se déplacent à une vitesse V voisine de celle de la lumière on montre que cette relation devient :

$$\lambda = \frac{h}{mv} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \quad (13)$$

2- Confirmation expérimentale de l'hypothèse de De Broglie

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

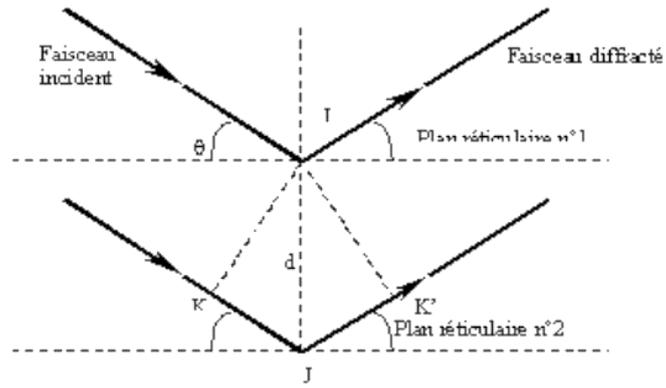


Figure 4 diffraction d'une onde sur les plans réticulaires d'un cristal

L'observation des figures de diffractions (les mêmes que celles fournies par la lumière) au niveau du faisceau réfléchi confirme donc la nature ondulatoire de l'électron. Supposons que ces électrons sont accélérés par une tension V , on a

$$eV = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (14)$$

Donc

$$p = \sqrt{2meV} \quad (15)$$

On déduit donc la longueur théorique associée à ces électrons

$$\lambda_{th} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}} \quad (16)$$

Donc pour l'électron on a :

$$\lambda_{th} = \frac{12,3}{\sqrt{V}} \quad (17)$$

Cette valeur théorique est comparable à celle obtenue expérimentalement à partir de la relation de Bragg :

$$\lambda_{exp} = 2d \sin \theta \quad (18)$$

3. Fonction d'onde d'une particule matérielle

Comme pour le photon, nous caractériserons l'état d'une particule matérielle à l'instant t par la donnée d'une fonction d'onde qui contient toutes les informations sur la particule. $\Psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence de la particule au point \vec{r} à l'instant t .

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ est la densité de probabilité de présence.

$dP = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ est la probabilité de trouver la particule à l'instant t dans l'élément de volume $d^3r = dx dy dz$

Il est évident que la probabilité totale pour trouver la particule n'importe où dans l'espace, à l'instant t , doit être finie et égale à l'unité :

$$\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (19)$$

La fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ est dite fonction de carrée sommable.

4. Equation d'onde

L'équation que vérifie la fonction d'onde est l'équation de Schrödinger :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (20)$$

On remarque qu'il s'agit d'une équation aux dérivées partielles linéaire. Le premier membre représente l'action sur la fonction d'onde d'un opérateur H défini par

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \quad (21)$$

H est appelé hamiltonien de la particule de masse m en mouvement dans le champ de forces dérivant du potentiel $V(\vec{r}, t)$. Δ étant l'opérateur laplacien. Le deuxième membre représente l'action sur la fonction d'onde de l'opérateur dérivation par rapport au temps multiplié par $i\hbar$.

$$H \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (22)$$

On peut justifier le bien fondé de l'équation de Schrödinger en considérant, pour simplifier une onde plane monochromatique.

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} = \Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} \quad (23)$$

L'énergie totale de la particule s'écrit :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (24)$$

On a :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E \Psi \quad (25)$$

$$\Delta \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi(\vec{r}, t) \quad (26)$$

A partir des équations (24),(25)et (26), on obtient l'équation suivante :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (27)$$

Qu'est l'équation de Schrödinger.

Les équations (24),(25) et (26) permettent également d'établir les règles de correspondances suivantes :

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

$$\vec{p}^2 \rightarrow -\hbar^2 \Delta$$

III. Le paquet d'ondes

D'après le principe de superposition, une solution plus générale de l'équation de Schrödinger (c à d) une fonction d'onde plus générale décrivant la particule libre est une combinaison linéaire de toute les ondes planes monochromatique possible, soit :

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - kx)} dk \quad (28)$$

Où $g(k)$ est une fonction généralement complexe de la variable k et qui est localisée autour d'une valeur k_0 et $1/\sqrt{2\pi}$ est un facteur multiplicatif utilisé pour la normalisation des fonctions.

A $t=0$, On a :

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (29)$$

On remarque que $\Psi(x, 0)$ et $g(k)$ sont transformées de Fourier l'une de l'autre :

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (30)$$

On a par conséquent la relation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |g(k)|^2 dk \quad (31)$$

Cette relation est appelée relation de Parseval et montre que si $g(k)$ est une fonction de carré sommable $\Psi(x, 0)$ l'est aussi. On peut donc pallier les insuffisances de l'onde plane monochromatique (qui n'est de carré sommable) en construisant des paquets d'ondes à partir de fonctions $g(k)$ adéquates.

Ce formalisme se généralise dans l'espace à trois dimensions et on aura :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} d\vec{k} \quad (32)$$

On utilise souvent en mécanique quantique l'impulsion à la place du vecteur d'onde ce qui conduit à :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} G(p) e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p} \cdot \vec{r})} d\vec{p} \quad (33)$$

IV. Vitesse de phase et vitesse de groupe

1. Vitesse de phase :

C'est la vitesse de propagation de l'onde. Elle est donnée par :

$$v_{\varphi} = \frac{\omega}{k} \quad (34)$$

2. Vitesse de groupe

C'est la vitesse de déplacement de maximum centrale de paquet d'onde

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (35)$$

V. Relations d'incertitude de Heisenberg

En mécanique classique la mesure de la position ou de la vitesse d'une particule peut être très précise et parfaite.

En mécanique quantique, nous avons vu que la particule est décrite par une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ qui représente l'amplitude de probabilité de trouver la particule au point \vec{r} à l'instant t . Il est donc exclu de connaître avec certitude la position ou la vitesse et de définir une trajectoire du mouvement.

La mécanique quantique impose donc une "limite fondamentale" à la précision avec laquelle on peut spécifier et mesurer des variables de ce type. Cette limite fut établie en 1927 par Heisenberg et est traduite par le principe d'incertitude dont l'expression spécifique et quantitative dans chaque cas particulier s'appelle une relation d'incertitude

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1 \quad (36)$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad (37)$$

CHAPITRE 3: PARTICULE DANS UN POTENTIEL STATIONNAIRE

I. Résolution de l'équation de Schrödinger.

On considère une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel $V(\vec{r})$ indépendant du temps et on se propose de déterminer sa fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$.

1. Méthode de séparation des variables.

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (1)$$

Comme l'évolution en \vec{r} et en t sont indépendantes, on peut donc faire une séparation des variables spatiale et temporelle. La fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ s'écrit sous la forme :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r})\chi(t) \quad (2)$$

On remplace dans l'équation (1), on obtient :

$$i\hbar \varphi \frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \chi \Delta \varphi + V \chi \varphi \quad (3)$$

En divisant les deux membres de l'équation (3) par $\chi \varphi$, on obtient :

$$i\hbar \frac{1}{\chi} \frac{\partial \chi}{\partial t} = \frac{\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \varphi + V \varphi}{\varphi} \quad (4)$$

Le membre de gauche est une fonction du temps tandis que le membre de droite est fonction uniquement de la position. Pour qu'il y ait égalité quelque soient \vec{r} et t il faut que les deux membres soient constants. Cette constante a les dimensions d'une énergie qu'on notera E . on obtient deux équations différentielles indépendantes :

$$i\hbar \frac{d\chi}{\chi} = E dt \quad (5)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta\varphi + V\varphi = E\varphi \quad (6)$$

C'est l'équation de Schrödinger indépendante de temps. Qui s'écrit :

$$H\varphi = E\varphi \quad (7)$$

Dites équations aux valeurs propres. E est la valeur propre ou énergie propre de H et φ est la fonction propre ou état propre de H. cette fonction propre doit être de carré sommable.

$$\int |\varphi(\vec{r})|^2 d^3r = 1 \quad (8)$$

L'équation (5) est une équation différentielle de premier ordre qui admet comme solution :

$$\chi(t) = Ne^{\frac{-iEt}{\hbar}} \quad (9)$$

N est une constante d'intégration

La fonction d'onde stationnaire s'écrit :

$$\Psi(\vec{r}, t) = N\varphi(\vec{r})e^{\frac{-iEt}{\hbar}} \quad (10)$$

La densité de probabilité de présence est donnée par :

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2 \quad (11)$$

Elle est donc indépendante de temps. On dit dans ce cas que la particule est dans **des états stationnaires** c'est-à-dire pour lesquels l'énergie E est constante. On obtient ces états en résolvant l'équation aux valeurs propres (7).

2. Modélisation de potentiels réels

A part les cas où le potentiel est nul ou constant, la situation la plus simple est celle où $V(\vec{r}, t)$ subit des discontinuités en restant constant entre deux discontinuités. La recherche des solutions pour de tels potentiels ne présente pas

de difficultés mathématiques et cela permettra de modéliser des situations réelles qu'on peut approximer par de tels potentiels suivant :

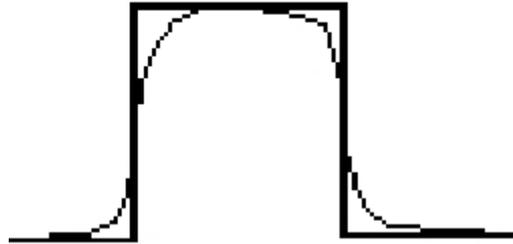


Figure 1 barriere de potentiel

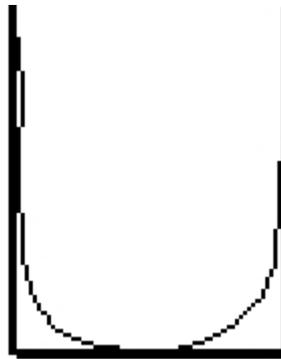


Figure 2 potentiel harmonique

II. Marche de potentiel

Pour simplifier le formalisme, on ne traitera dans la suite que des potentiels à une seule variable d'espace x .

Soit une particule "incidente" d'énergie E venant des x négatifs et se dirigeant vers les x positifs. Cette particule rencontre en $x=0$ une marche de potentiel V_0 définie par

$$\begin{cases} V(x) = 0, & \text{pour } x < 0 \\ V(x) = V_0, & \text{pour } x > 0 \end{cases} \quad (12)$$

Nous devons considérer deux cas, suivant que l'énergie E est supérieure ou inférieure à la marche V_0 .

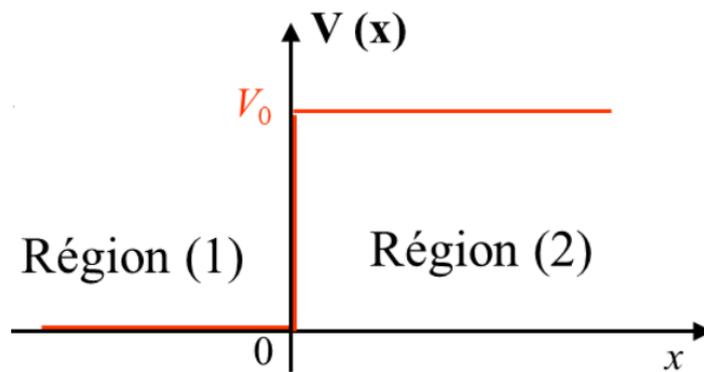


Figure 3: Marche de potentiel

1. Cas où $E > V_0$

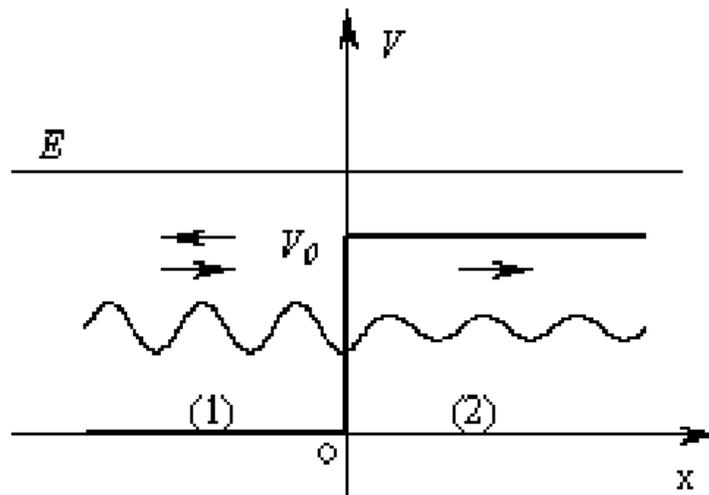


Figure 3: Marche de potentiel ($E > V_0$)

a. Etude classique

La particule d'énergie E a une vitesse $\sqrt{\frac{2E}{m}}$ dans la région (1), elle est ralentie à la discontinuité et prend la vitesse $\sqrt{\frac{2(E-V)}{m}}$ dans la région (2). On dit qu'il ya transmission totale

b. Etude quantique

L'équation de Schrödinger peut s'écrire :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial^2 x} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \varphi = 0 \quad (13)$$

Dans la région (1), cette équation s'écrit sous la forme suivante :

$$\varphi_1'' + k_1^2 \varphi_1 = 0 \quad (14)$$

C'est une équation différentielle de second ordre qui a pour solution :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (15)$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (16)$$

Dans la région (2), l'équation

$$\varphi_2'' + k_2^2 \varphi_2 = 0 \quad (17)$$

On obtient une équation différentielle de second ordre qui a pour solution :

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \quad (18)$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \quad (19)$$

$A_1 e^{ik_1 x}$ représente l'onde incidente, $A'_1 e^{-ik_1 x}$ représente l'onde réfléchie par le saut de potentiel.

$A_2 e^{ik_2 x}$ représente l'onde transmise, $A'_2 e^{-ik_2 x}$ représente l'onde réfléchie de l'infini ce qu'est impossible. Donc $A'_2 = 0$.

Les solutions donc dans les deux régions sont :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (20)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} \quad (21)$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée sont :

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0) \quad (22)$$

$$\varphi'_1(0) = \varphi'_2(0) \quad (23)$$

Ces deux conditions donnent :

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \quad (24)$$

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad (25)$$

On définit alors les coefficients de réflexion R et de transmission T de la particule par :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 \quad (26)$$

$$T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 \frac{V_{g2}}{V_{g1}} \quad (27)$$

V_{g1} et V_{g2} sont les vitesses de groupe associées aux paquets d'ondes dans les deux régions :

$$V_{g1} = \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$V_{g2} = \frac{\hbar k_2}{m}$$

Les coefficients de réflexion et de transmission deviennent alors

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 \quad (28)$$

$$T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (29)$$

On vérifie bien que l'on a $R+T=1$.

En conclusion on peut dire que contrairement aux prévisions classiques la particule a une probabilité non nulle de revenir en arrière (figure 3).

2. Cas où $E < V_0$

a. étude classique :

La réflexion est totale, La particule a une vitesse $\sqrt{\frac{2E}{m}}$ dans la région (1), elle rebondit élastiquement à la discontinuité et repart avec la même vitesse.

b. étude quantique :

Les fonctions d'ondes dans les deux régions sont données par :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (30)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x} \quad (31)$$

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (32)$$

$$\rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \quad (33)$$

Pour que $\varphi_2(x)$ reste bornée lorsque x tend vers l'infini il faut que $B_2=0$. Les fonctions d'ondes deviennent alors :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (34)$$

$$\varphi_2(x) = B'_2 e^{-\rho_2 x} \quad (35)$$

La fonction d'onde $B'_2 e^{-\rho_2 x}$ s'appelle l'onde évanescente.

Les mêmes conditions de quantification que précédemment, on montre que le coefficient de réflexion $R=1$.

Donc en mécanique quantique, La réflexion est totale. Cependant, on peut remarquer que la densité de probabilité de présence de la particule dans la région ($x>0$) n'est pas nulle et dépend de x . cette densité de probabilité est donnée par :

$$|\varphi_2(x)|^2 = |B'_2|^2 e^{-2\rho_2 x} \quad (36)$$

Cette probabilité qui décroît exponentiellement en fonction de x et devient négligeable lorsque x est supérieure à la portée $\frac{1}{\rho_2}$ de l'onde évanescente.

Donc les particules avant d'être réfléchies, pénètrent dans la région (2) sur une profondeur de l'ordre $\frac{1}{\rho_2}$.

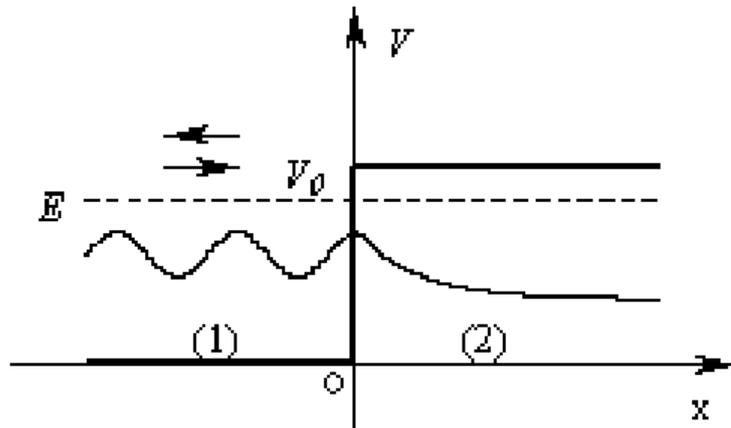


Figure 4 : Marche de potentiel($E < V_0$)

III. Barrière de potentiel

On considère une particule qui arrive sur une barrière de potentiel V_0 de largeur a . Cette particule est représentée par un potentiel qui est discontinu aux deux points d'abscisse $x=0$ et $x=a$. La description de l'énergie potentielle $V(x)$ est la suivante :

$$\begin{cases} V(x) = 0, x < 0 \\ V(x) = V_0, 0 \leq x \leq a \\ V(x) = 0, x > a \end{cases} \quad (37)$$

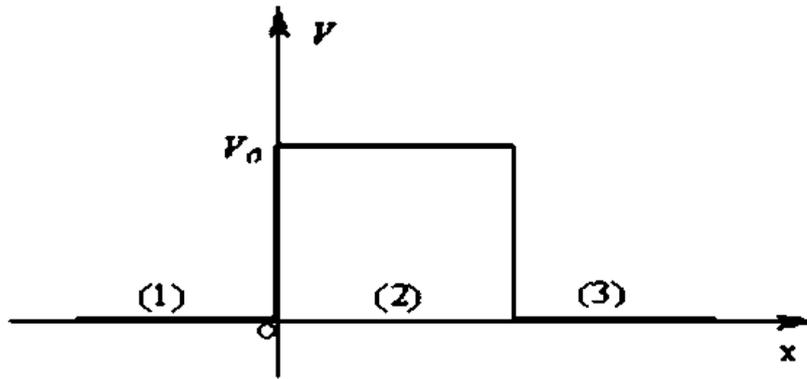


Figure 5 : Barriere carrée de potentiel

1. Cas où $E < V_0$: Effet Tunnel

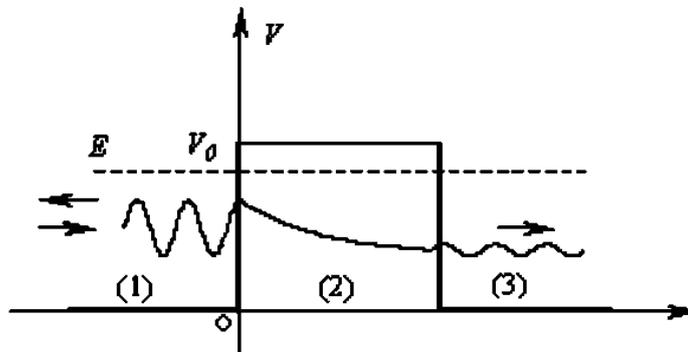


Figure 6 : Barriere carrée de potentiel

La barrière de potentiel est infranchissable pour la particule classique qui est toujours réfléchiée dans la région (1).

En mécanique quantique, On montre facilement que les fonctions d'onde de la particule dans ces régions s'écrivent :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (38)$$

$$\varphi_2(x) = A_2 e^{\rho_2 x} + A'_2 e^{-\rho_2 x} \quad (39)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad (40)$$

k_1 et ρ_2 ont leur signification précédente et A'_3 doit être nul car toute réflexion à l'infini est impossible. Les conditions de continuité en $x=0$ et $x=a$ donnent,

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2) \text{sh}^2(\rho_2 a)}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (41)$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{2k_1^2 \rho_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \text{sh}^2(\rho_2 a)} \quad (42)$$

Le coefficient de transmission T , qui représente la densité relative de particules ayant franchi la barrière est donc non nulle. Donc la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet Tunnel.

On utilise très souvent la notion d'effet tunnel, pour désigner ce passage des particules à travers une barrière de potentiel infranchissable en mécanique classique.

Etude des deux cas limites d'une barrière très étroite et très large :

-cas d'une barrière très étroite (a très petit), dans ce cas on trouve $T=1$. Cela veut dire que la transmission est totale quel que soit le potentiel $V_0 > E$.

-Approximation de la barrière épaisse

Cette approximation correspond à la situation où $\rho_2 a \gg 1$, dans ce cas, on a :

$$\text{sh}(\rho_2 a) \approx e^{\rho_2 a} \quad (43)$$

Le coefficient de transmission s'écrit alors :

$$T = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 a} \quad (44)$$

Si a tend vers l'infini, $T = 0$ et on retrouve le cas de la marche de potentiel.

2. Cas où $E > V_0$: Transfert résonnant

En mécanique classique, on a toujours une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région centrale.

En mécanique quantique ; on obtient les fonctions d'onde suivantes :

$$\varphi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad (45)$$

$$\varphi_2(x) = B_2 e^{ik_2 x} + B'_2 e^{-ik_2 x} \quad (46)$$

$$\varphi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad (47)$$

$A'_3 = 0$ car la réflexion à l'infini est impossible.

On montre que :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(k_2 a)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \quad (48)$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{2k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a)} \quad (49)$$

IV. Puits de potentiel (TD)

CHAPITRE 4 FORMALISME MATHÉMATIQUE DE LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

I. Espace des fonctions d'onde d'une particule

1. définition

L'espace des fonctions d'onde d'une particule est un espace de fonctions de carrés sommables car nous avons vu que $\int |\Psi|^2 d^3r$ est toujours une quantité finie et égale à l'unité puisqu'elle représente la probabilité totale de trouver la particule dans l'espace. $\Psi(\vec{r}, t)$ doit appartenir à l'ensemble (espace) de fonctions de carré sommable, cet ensemble est noté \mathcal{L}^2 .

L'ensemble de ces fonctions, étant trop vaste, nous n'allons considérer que les fonctions $\Psi(\vec{r}, t)$ partout définies et continues ; indéfiniment dérivables et à support borné. Cet ensemble s'appelle ξ , qui contient ces fonctions, est un sous-espace de \mathcal{L}^2 .

2-Structure de l'espace ξ des fonctions d'onde

a. ξ est un espace vectoriel

ξ est un espace vectoriel formé des fonctions de carré sommable. Ainsi si les fonctions $\Psi_1(x)$ et $\Psi_2(x)$ appartiennent à ξ et si λ_1 et λ_2 sont deux nombres complexes quelconques alors la fonction $\Psi(x)$ donnée par

$$\Psi(x) = \lambda_1 \Psi_1(x) + \lambda_2 \Psi_2(x) \quad (1)$$

Appartient également à ξ .

b. Produit scalaire

On définit le produit scalaire dans ξ d'une fonction $\phi(x)$ par une fonction $\Psi(x)$ par le nombre complexe noté

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx \quad (2)$$

Les propriétés de ce produit scalaire sont :

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* \quad (3)$$

$$\langle \phi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (4)$$

$$\langle \lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \phi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \psi \rangle \quad (5)$$

Les fonctions ϕ et ψ sont orthogonales si :

$$\langle \phi | \psi \rangle = 0 \quad (6)$$

$\langle \psi | \psi \rangle$ est un réel positif qui est nul si et seulement si $\psi = 0$, sa racine positive $\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$ est appelée norme de ψ .

3- Bases orthonormées complète discrètes dans ξ

a. définition :

Soit un ensemble dénombrable de fonctions de carré sommable $\{u_i(x)\}$ ($i=1,2,\dots$).

Cet ensemble est orthonormé si :

$$\langle u_i | u_j \rangle = \int u_i^*(x) u_j(x) dx = \delta_{ij} \quad (7)$$

δ_{ij} est le symbole de Kronecker

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (8)$$

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

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x) \quad (9)$$

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

$$c_i = \langle u_i | \psi \rangle \quad (10)$$

Les fonctions $u_i(x)$ satisfaisant les conditions (7) et (9) forment alors une base orthonormée complète discrète.

b-relation de fermeture :

La relation de fermeture exprime le fait que l'ensemble $\{u_i(x)\}$ constitue une base. Cette relation s'écrit :

$$\sum_i u_i^*(x')u_i(x) = \delta(x - x') \quad (11)$$

Réciproquement, on peut montrer que: si un ensemble orthonormé $\{u_i(x)\}$ vérifie la relation de fermeture (11), alors il constitue une base.

4. Base orthonormée complète continue de ξ .

a. Définition

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

Relation d'orthogonalité :

$$\int V_\alpha^*(x)V_\beta(x)dx = \delta(\alpha - \beta) \quad (12)$$

Relation de fermeture:

$$\int V_\alpha^*(x')V_\alpha(x)d\alpha = \delta(x - x') \quad (13)$$

Les $V_\alpha(x)$ ne sont pas forcément des fonctions de ξ , ni de \mathcal{L}^2 , car pour $\alpha = \beta$, la fonction $V_\alpha(x)$ n'est pas de carré sommable.

b - Composantes d'une fonction d'onde $\psi(x)$

Toute fonction $\psi(x)$ peut se développer sur les $V_\alpha(x)$:

$$\psi(x) = \int c(\alpha) V_\alpha(x)d\alpha \quad (14)$$

Les $c(\alpha)$ sont les composantes de $\psi(x)$ sur la base $\{V_\alpha(x)\}$.

On montre que :

$$c_\alpha = \langle V_\alpha | \psi \rangle = \int V_\alpha^*(x) \psi(x) dx \quad (15)$$

Correspondance : base discrète-base continue :

$$i \leftrightarrow \alpha \quad (16)$$

$$\sum_i \leftrightarrow \int d\alpha \quad (17)$$

$$\delta_{ij} \leftrightarrow \delta(\alpha - \alpha') \quad (18)$$

c. Exemples de fonctions $v_\alpha(x)$

-les ondes planes:

Soit la fonction $V_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$ décrivant une onde plane de vecteur d'onde

$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$; cette fonction n'est de carré sommable.

$\{V_p(x)\}$ désignera l'ensemble de toutes les ondes planes correspondantes aux diverses valeurs de p , avec p variant d'une façon continue de $-\infty$ à $+\infty$

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) V_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \quad (19)$$

Les $v_p(x)$ vérifient les relations suivantes:

-Relation d'orthogonalité:

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

Donc on a:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V_p^*(x) V_{p'}(x) dx = \delta(p - p') \quad (20)$$

- Relation de fermeture:

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

Donc:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} V_p^*(x') V_p(x) dx = \delta(x-x') \quad (21)$$

Avec $u = \frac{x}{\hbar}$ et $k = \frac{p}{\hbar}$

Les résultats des intégrales découlant des transformées de Fourier des fonctions de Dirac.

Les $v_p(x)$ forment donc une base orthonormée complète continue et toute fonction $\Psi(x)$ se développe de façon unique suivant les $v_p(x)$:

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) V_p(x) dp \quad (22)$$

Avec

$$c_p = \langle V_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \Psi(x) dx = \bar{\Psi}(p) \quad (23)$$

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

$$\Psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\Psi}(p) V_p(x) dp \quad (24)$$

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

On écrit souvent pour simplifier le formalisme :

$$\bar{\Psi}(p) = \langle p | \Psi \rangle \quad (25)$$

C'est la représentation $\{p\}$.

Les fonctions delta :

C'est l'ensemble des fonctions localisées aux différents points x_0 :

$$V_{x_0}(x) = \delta(x - x_0) \quad (26)$$

Avec $x_0 = \alpha$, donc x_0 varie de $-\infty$ à $+\infty$.

Les $v_{x_0}(x)$ vérifient les relations d'orthogonalité et de fermeture :

-Relation d'orthogonalité :

$$\int V_{x_0}^*(x) V_{x'_0}(x) dx = \delta(x_0 - x'_0) \quad (27)$$

-Relation de fermeture :

$$\int V_{x_0}(x) V_{x'_0}^*(x) dx_0 = \delta(x - x') \quad (28)$$

Les $V_{x_0}(x)$ forment une base orthonormée complète continue et toute fonction $\Psi(x)$ peut se s'écrire sous la forme suivante :

$$\Psi(x) = \int c_{x_0} V_{x_0}(x) dx_0 \quad (29)$$

Et on sait que :

$$c_{x_0} = \langle V_{x_0} | \Psi(x) \rangle = \int \delta(x - x_0) \Psi(x) dx = \Psi(x_0) \quad (30)$$

D'où :

$$\Psi(x) = \int \Psi(x_0) V_{x_0}(x) dx_0 = \int \Psi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0 \quad (31)$$

Donc toute fonction $\Psi(x)$ peut être considérée comme une superposition linéaire de fonctions $\delta(x-x_0)$, le coefficient multipliant la fonction $\delta(x - x_0)$ centrée au point x_0 étant la valeur de $\psi(x)$ en x_0 . On écrit souvent :

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle \quad (32)$$

C'est la représentation $\{x\}$.

II. -Espace des états - Notations de Dirac

1. Définition

Choisir une représentation c'est se donner une base orthonormée complète (discrète ou continue) suivant laquelle se décompose chaque fonction de ξ .

L'état quantique de la particule est représenté par un vecteur appartenant à l'espace des états qu'est un espace vectoriel qu'on peut confondre avec ξ .

On notera $|\Psi\rangle$ ce vecteur et on l'appellera vecteur "ket" : C'est la notation de Dirac.

2. Vecteurs "kets" et vecteurs "bras"

On représente le vecteur ket $|\Psi\rangle$ sous la forme d'une matrice à une colonne et à plusieurs lignes.

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi(x) \\ \Psi(x') \\ \vdots \\ \vdots \\ \Psi(x^i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{\Psi}(p) \\ \bar{\Psi}(p') \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{\Psi}(p^i) \end{pmatrix} \quad (33)$$

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

$$\langle\Psi| = (c_1^* c_2^* \dots c_i^* \dots) = (\dots \Psi^*(x) \dots \Psi^*(x') \dots \Psi^*(x_i) \dots) = (\dots \bar{\Psi}^*(p) \dots \bar{\Psi}^*(p') \dots \bar{\Psi}^*(p_i) \dots) \quad (34)$$

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

3-Correspondance entre kets et bras

A tout "ket" correspond un "bra" et la correspondance est antilinéaire.

$$|\Psi\rangle = \lambda_1 |\Psi_1\rangle + \lambda_2 |\Psi_2\rangle \quad (35)$$

Correspond

$$\langle\Psi| = \lambda_1^* \langle\Psi_1| + \lambda_2^* \langle\Psi_2| \quad (36)$$

Remarques:

- Comme $|\lambda\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle$ alors $\langle\lambda\Psi| = \lambda^* \langle\Psi|$.

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

III. Opérateurs linéaires

1. Définition

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

$$|\Psi'\rangle = A |\Psi\rangle \quad (37)$$

$$A(\lambda_1 |\Psi_1\rangle + \lambda_2 |\Psi_2\rangle) = \lambda_1 A |\Psi_1\rangle + \lambda_2 A |\Psi_2\rangle \quad (38)$$

Exemples:

Dans la représentation $\{x\}$ on a:

Opérateur X: $\Psi(x) \rightarrow x\Psi(x)$.

Opérateur P: $\Psi(x) \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x)$

2. Produit de deux opérateurs Commutateur

Le produit de deux opérateurs linéaires A et B, noté AB est défini par:

$$(AB) |\Psi\rangle = A(B |\Psi\rangle) \quad (39)$$

B agit d'abord, A ensuite, car en général le produit AB est différent du produit BA.

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

$$[A, B] = AB - BA \quad (40)$$

Si $[A, B] = 0$ on dit que les deux opérateurs A et B commutent.

3. Représentation d'un opérateur par une matrice

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

$$A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle = \int u_i^*(x) A u_j(x) dx \quad (41)$$

Donc l'équation

$$| \Psi' \rangle = A | \Psi \rangle \quad (42)$$

S'écrit donc sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ \vdots \\ c_i' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1j} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{i1} & \cdots & A_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \end{pmatrix} \quad (43)$$

La représentation matricielle reste la même dans la base continue, à la seule différence que l'indice i est remplacé par un indice α .

$$A_{\alpha\alpha'} = \langle v_\alpha | A | v_{\alpha'} \rangle \quad (44)$$

$$c_{\alpha'} = \int c_\alpha A_{\alpha\alpha'} d\alpha' \quad (45)$$

4.Exemple d'opérateur linéaire: Le projecteur (voir TD).

On appelle projecteur sur l'état normé $| \Psi \rangle$ l'opérateur P_Ψ défini par:

$$P_\Psi = | \Psi \rangle \langle \Psi | \quad (46)$$

IV. Opérateurs adjoints

1. définitions

a-Deux opérateurs A et A^+ sont dits adjoints si les matrices qui les représentent dans une base donnée $\{u_i\}$ sont adjointes l'une de l'autre:

$$\langle u_j | A^+ | u_i \rangle = \langle u_i | A | u_j \rangle^* \quad (47)$$

Pour deux kets $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ quelconque on a:

$$\langle \Phi | A^+ | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Phi \rangle^* \quad (48)$$

b-Une autre définition de l'opérateur A^+ adjoint de A est:

$$A |\Psi'\rangle = |\Psi\rangle \Leftrightarrow \langle \Psi' | = \langle \Psi | A^+ \quad (49)$$

2. Propriétés

$$(A^+)^+ = A \quad (50)$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+ \quad (51)$$

$$(\lambda A^+)^+ = \lambda^* A \quad (52)$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \quad (53)$$

3. Règles de conjugaison.

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

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

Exemple:

L'expression conjuguée de $\lambda AB |\Psi\rangle$ est $\lambda^* \langle \Psi | B^+ A^+$.

V. Opérateurs hermétiques

Un opérateur A est hermétique si:

$$A = A^\dagger \quad (54)$$

Il s'ensuit que les éléments de matrice de A dans une représentation donnée $\{u_i\}$ sont tels que:

$$A_{ij} = A_{ji}^* \quad (55)$$

Et plus généralement pour deux kets $|\Psi\rangle$ et $|\Phi\rangle$ quelconque on a:

$$\langle \Phi | A^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Phi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Phi \rangle^* \quad (56)$$

$$\langle A \Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | A \Psi \rangle \quad (57)$$

VI. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur

1. Définition

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

$$A |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \quad (58)$$

2. Remarques :

La valeur propre a_n est dite dégénérée s'il lui correspond au moins deux vecteurs propres normés différents :

$$A |\phi_n^\alpha\rangle = a_n |\phi_n^\alpha\rangle \quad (59)$$

L'ensemble des $|\phi_n^\alpha\rangle$ un sous-espace ξ_n appelé sous-espace de dégénérescence de la valeur propre a_n .

Un indice supplémentaire α est alors nécessaire pour distinguer les divers kets propres correspondant à la valeur propre a_n .

$A | u_n \rangle = a_n | u_n \rangle$ implique que $\langle u_n | A^\dagger = a_n^* \langle u_n |$

3. Equation caractéristique

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

$$A |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle \quad (60)$$

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

$$\langle u_i | A | \Psi \rangle = \lambda c_i \quad (61)$$

En insérant la relation de fermeture entre A et Ψ on obtient :

$$\langle u_i | A \sum_j | u_j \rangle \langle u_j | \Psi \rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \Psi \rangle = \lambda c_i \quad (62)$$

$$\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i \quad (63)$$

On rappelle que la relation de fermeture est :

$$\sum_j | u_j \rangle \langle u_j | = 1$$

Soit

$$\sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) c_j = 0 \quad (64)$$

On obtient un système d'équations linéaires homogènes qui admet une solution différente de zéro si et seulement si le déterminant correspondant est nul, soit :

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (65)$$

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

4. Vecteurs propres et valeurs propres d'un opérateur hermétique

Les valeurs propres d'un opérateur hamiltonien sont réelles. En effet :

Si on a

$$A |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \quad (66)$$

Alors on a

$$\langle \phi_n | A^\dagger = a_n^* \langle \phi_n | \quad (67)$$

En projetant les équations (66) et (67) sur $|\phi_n\rangle$ il vient :

$$\langle \phi_n | A | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_n | \phi_n \rangle = a_n \quad (68)$$

$$\langle \phi_n | A^\dagger | \phi_n \rangle = a_n^* \langle \phi_n | \phi_n \rangle = a_n^* \quad (69)$$

Comme $A^\dagger = A$, on a $a_n = a_n^*$

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

En effet si on a :

$$A |\phi_n\rangle = a_n |\phi_n\rangle \quad (70)$$

et

$$\langle \phi_m | A = a_m \langle \phi_m | \quad (71)$$

Alors on a

$$\langle \phi_m | A | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle \quad (72)$$

Et

$$\langle \phi_m | A | \phi_n \rangle = a_m \langle \phi_m | \phi_n \rangle \quad (73)$$

L'équation (72)-(73), on obtient :

$$(a_n - a_m) \langle \phi_m | \phi_n \rangle = 0 \quad (74)$$

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

VII. Observables

1. Définition

Une observable est un opérateur hermétique dont le système de vecteurs propres $\{ | u_n^\alpha \rangle \}$ est non seulement orthonormé mais complet et on toujours :

Relation d'orthogonalité :

$$\langle u_n^{\alpha'} | u_n^\alpha \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (75)$$

Relation de fermeture :

$$\sum_n \sum_\alpha | u_n^\alpha \rangle \langle u_n^\alpha | = 1 \quad (76)$$

2. Observables qui commutent

Théorème 1

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

Théorème 2

“Si deux observables A et B commutent, l'élément de matrice de B entre deux vecteurs propres de A, de valeurs propres différentes est nul”.

3. Ensemble complet d'observables qui commutent

Soit une observable A et une base de ξ formée des vecteurs propres $\{ | u_n^\alpha \rangle \}$ de A. Si aucune des valeurs propres de A n'est dégénérée, les divers vecteurs de base peuvent être repérés par la valeur propre a_n et l'indice α dans $\{ | u_n^\alpha \rangle \}$ est inutile. Dans ce cas tous les sous-espaces propres ξ_n associés à la valeur propre a_n sont de dimension 1 et la donnée de la valeur propre a_n détermine de manière unique le vecteur propre correspondant $| u_n \rangle$. Il existe donc une seule base de ξ formée avec des vecteurs propres de A et on dit que l'observable A constitue à elle seule un ensemble complet d'observables qui commutent (E.C.O.C.) dans ξ .

Si au contraire certaines valeurs propres de A sont dégénérées, la donnée de la valeur propre a_n ne suffit plus à caractériser un seul vecteur de base puisque les sous-espaces propres ξ_n sont de dimension supérieure à 1. Dans ce cas la base des vecteurs propres de A n'est pas unique et A ne constitue plus à lui seul un E.C.O.C.

Considérons alors une autre observable B qui commute avec A et construisons une base orthonormée de vecteurs propres communs à A et B en résolvant l'équation aux valeurs propres de B à l'intérieur de chaque sous-espace ξ_n . Si dans ξ_n , toutes les valeurs propres b_m de B sont non dégénérées la donnée du couple (a_n, b_m) spécifie complètement le vecteur propre commun à A et B : ces vecteurs propres constituent alors une base unique et on dit que A et B forment un E.C.O.C.

Si par contre b_m est dégénérée, l'ensemble des $|\chi_{n,m}^\beta\rangle$ sous-tend un sous-espace ξ_m de ξ_n tel que tout vecteur de ξ_m est vecteur propre commun de A et B avec les valeurs propres a_n et b_m , mais au couple (a_n, b_m) correspond plusieurs vecteurs propres et la base formée par ces vecteurs n'est pas unique. On cherche alors une autre observable C commutant avec A et B et on diagonalise C à l'intérieur de ξ_m . Si toutes les valeurs propres c_p de C à l'intérieur de ξ_m sont non dégénérées, la donnée du triplet (a_n, b_m, c_p) spécifie complètement le vecteur propre commun unique, sinon on prendra une quatrième observable D ...

En conclusion :

Une suite A, B, C, \dots d'observables forment un E.C.O.C, si ces observables commutent 2 à 2 et si chaque vecteur propre de leur système de base commun est défini de façon unique par la donnée des valeurs propres a_n, b_m, c_p, \dots correspondantes de A, B, C, \dots

CHAPITRE 5: POSTULATS DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

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

A l'échelle quantique nous avons vu qu'on ne peut mesurer simultanément la position et la vitesse de la particule (principe d'incertitude de Heisenberg).

La position et la quantité de mouvement d'une particule ne caractérisent plus son état puisqu'on ne peut plus les mesurer simultanément et définir ainsi une trajectoire.

A la description classique en termes de position et d'impulsion il faut donc substituer une description quantique en termes d'autres données représentatives de l'état du système et des grandeurs physiques qui lui sont associées. Ces données sont la fonction d'onde et les opérateurs.

Cette nouvelle vision, différente de notre manière de pensée classique est construite à partir postulats de la mécanique quantique qui vont nous permettre de décrire :

- L'état d'un système physique à un instant donné.

- Les grandeurs physiques associées au système et la prédiction du résultat de leur mesure.
- L'évolution du système au cours du temps.
- Les règles de quantification des grandeurs physiques.

Il faut remarquer que la validité de ces postulats et par conséquent celle de la théorie quantique est plus que largement confortée par toutes les expériences effectuées dans les différents domaines de la physique microscopique.

I. Etat d'un système, Premier postulat :

L'état d'un système physique est complètement défini à tout instant t par la donnée d'un ket $|\Psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états ξ . $|\Psi(t)\rangle$ est appelé vecteur d'état.

Comme $|\Psi(t)\rangle$ appartient à l'espace vectoriel ξ il en résulte que les états du système sont linéairement superposables. Ainsi si $|\Psi_1(t)\rangle$ et $|\Psi_2(t)\rangle$ sont deux états possibles d'un système physique, toute combinaison linéaire $\lambda_1 |\Psi_1(t)\rangle + \lambda_2 |\Psi_2(t)\rangle$ est aussi un état du système.

L'état d'un système peut également être défini par les composantes de $|\Psi(t)\rangle$ dans une représentation donnée. Ainsi en représentation $\{\vec{r}\}$ la coordonnée $\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle$ qui n'est autre que la fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ définit aussi l'état du système. $\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle$ est une fonction de carré sommable.

En général la norme de $|\Psi(t)\rangle$ est arbitraire mais il est commode d'utiliser des vecteurs d'état normés, c'est à dire pour lesquels :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \tag{1}$$

Ce qui conduit à :

$$\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \int \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle = \int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = 1 \quad (2)$$

II -Description d'une grandeur physique, Deuxième postulat.

En mécanique classique lorsqu'on connaît l'état du système on déduit immédiatement toutes les grandeurs physiques qui lui sont associées car états et grandeurs physiques sont décrits par les mêmes variables dynamiques $\vec{r}(t)$ et $\vec{p}(t)$.

En mécanique quantique état d'un système et grandeurs mesurables sont représentés par des êtres mathématiques différents :

Alors que l'état est décrit par un vecteur, les grandeurs physiques sont décrites par des opérateurs.

III- Mesure d'une grandeur physique, Troisième postulat :

1- Résultat de la mesure.

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

2- Prédiction de la mesure

A la différence de la mécanique classique où le résultat de la mesure d'une grandeur physique est toujours certain et reproductible lorsque la mesure se fait dans les mêmes conditions, la mécanique quantique introduit un indéterminisme qui fait que la prédiction de la mesure est de type probabiliste.

Cette probabilité dépend à la fois de l'état du système et de la nature du spectre des valeurs propres.

Si l'état $|\Psi\rangle$ du système se confond avec un vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ de A correspondant à la valeur propre a_n , le résultat de la mesure de A est certain, c'est a_n si non, on ne peut prévoir que statistiquement le résultat de la mesure.

Les postulats qui suivent et qu'on appelle postulats de décomposition spectrale donnent les règles qui permettent de calculer la probabilité de cette mesure.

a- Spectre discret non dégénéré

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre non dégénérée de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = |\langle \varphi_n | \Psi \rangle|^2 \quad (3)$$

$|\varphi_n\rangle$ étant le vecteur propre normé de A correspondant à la valeur propre a_n

Dans ce cas les $|\varphi_n\rangle$ constituent une base dans ξ et le vecteur d'état s'écrit :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle \quad (4)$$

Avec

$$c_n = \langle \varphi_n | \Psi \rangle$$

La probabilité $P(a_n)$ s'écrit :

$$P(a_n) = |c_n|^2 \quad (5)$$

b- Spectre discret dégénéré.

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité d'obtenir comme résultat la valeur propre dégénérée de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = \sum_{\alpha=1}^{g_n} |\langle \varphi_n^\alpha | \Psi \rangle|^2 \quad (6)$$

g_n est le degré de dégénérescence de la valeur propre a_n et $\{|\varphi_n^\alpha\rangle\}$ ($\alpha = 1, \dots, g_n$) un système orthonormé de vecteurs propres associé à a_n .

c- Spectre continu non dégénéré.

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ la probabilité $dP(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ est :

$$dP(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha \quad (7)$$

$|v_\alpha\rangle$ étant le vecteur propre correspondant à la valeur propre continue α de l'observable A associée à A.

IV- Réduction du paquet d'ondes

Les postulats sur la prédiction de la mesure nous enseignent que lorsqu'on connaît l'état $|\Psi(t)\rangle$ du système à un instant donné, on peut prédire les probabilités d'obtenir les divers résultats possibles de mesure d'une grandeur physique. Toutefois lorsqu'on effectue cette mesure, on obtient un seul de ces résultats possibles et immédiatement après la mesure on a une certitude du résultat obtenu qui se traduit par un changement du vecteur d'état du système, qui saute de son état initial à son état compatible avec le résultat de la mesure. La mesure perturbe donc le système.

Si la mesure de A donne une valeur propre non dégénérée a_n de l'observable A on postule que l'état du système immédiatement après la mesure est le vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ associé à a_n .

Le postulat de réduction du paquet d'ondes s'énonce alors ainsi :

Lorsque la mesure de la grandeur physique A sur le système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du 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 .
 Si a_n est non dégénérée, cet état est le vecteur propre $|\varphi_n\rangle$ correspondant.

V- Evolution dans le temps ,Quatrième postulat.

L'évolution au cours du temps de l'état d'un système physique est décrite par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (8)$$

où $|\Psi(t)\rangle$ est le vecteur d'état du système et $H(t)$ l'observable associée à son énergie totale.

$H(t)$ est appelé opérateur hamiltonien. Pour une particule, il s'écrit en représentation $|\vec{r}\rangle$:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \quad (9)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors dans cette représentation :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (10)$$

VI- Quantification des grandeurs physiques, Cinquième postulat :

Ce postulat indique les règles de construction d'une observable A associée à une grandeur physique A ayant un équivalent classique. Comme la grandeur A s'exprime en fonction des variables dynamiques \vec{r} et \vec{p} , l'observable A s'exprimera en fonction des opérateurs \vec{R} et \vec{P} suivant les règles de quantification suivantes :

-Au vecteur position $\vec{r}(x, y, z)$ de la particule est associée l'observable $\vec{R}(X, Y, Z)$.

-A l'impulsion $\vec{P}(p_x, p_y, p_z)$ de la particule est associée l'observable $\vec{P}(P_X, P_Y, P_Z)$

-A toute grandeur physique A définie classiquement est associée une observable A obtenue en remplaçant dans l'expression convenablement symétrisée de A, \vec{R} et \vec{P} par les observables \vec{R} et \vec{P} respectivement.

CHAPITRE 6: OSCILLATEUR HARMONIQUE

I. L'oscillateur harmonique en mécanique classique

En mécanique classique, une particule de masse m se déplaçant sans frottement sur l'axe horizontal \overrightarrow{Ox} sous l'action d'une force de rappel proportionnelle à l'élongation $\vec{F} = -kx\vec{u}_x$ et dérivant du potentiel $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$

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

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad (1)$$

Avec $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

ω est la pulsation, k est une constante positive et m la masse de la particule.

La solution de cette équation est purement sinusoïdale et s'écrit :

$$x = x_M \cos(\omega t - \varphi) \quad (2)$$

La particule est donc animée d'un mouvement oscillatoire sinusoïdal d'amplitude x_M , de pulsation ω et de phase φ .

x_M et φ sont déterminés par les conditions initiales.

Les énergies cinétique et potentielle de la particule valent respectivement :

$$T = \frac{1}{2}mV^2 = \frac{1}{2}mx_M^2\omega^2 \sin^2(\omega t - \varphi) \quad (3)$$

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}mx_M^2\omega^2 \cos^2(\omega t - \varphi) \quad (4)$$

Donc l'énergie totale de la particule est donnée par

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}mx^2\omega^2 \quad (5)$$

$$E = T + V = \frac{1}{2} m x_M^2 \omega^2 \quad (6)$$

On remarque que l'énergie totale E est donc indépendante du temps, on dit que le système conservatifs.

De plus l'énergie E peut prendre n'importe quelles valeurs positives ou nulles, puisque x_M est quelconque. Le mouvement de la particule dans ce cas est borné et se limite à des oscillations les points $-x_M$ et $+x_M$

II. L'oscillateur harmonique en mécanique quantique :

En mécanique quantique, on sait que :

Aux grandeurs classiques x et p , on associe les observables X et P vérifiant la relation de commutation suivante :

$$[X, P] = i\hbar \quad (7)$$

On obtient donc l'opérateur hamiltonien du système à partir de l'équation (5), en remplaçant les grandeurs x et p par les observables X et P_x :

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \quad (8)$$

On remarque que l'Hamiltonien H du système ne dépend pas explicitement du temps, donc l'étude quantique de l'oscillateur se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H | \varphi \rangle = E | \varphi \rangle \quad (9)$$

Soit donc en remplaçant l'hamiltonien par sa valeur, on obtient :

$$\left(\frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2 \right) | \varphi \rangle = E | \varphi \rangle \quad (10)$$

Cette équation s'écrit en représentation $\{ | x \rangle \}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \varphi(x) = E \varphi(x) \quad (11)$$

Pour étudier l'oscillateur harmonique en mécanique quantique, on a deux méthodes :

La première méthode consiste à intégrer l'équation différentielle de second ordre (11).

La Deuxième méthode est la méthode des opérateurs qui consiste à résoudre l'équation aux valeurs propres (9).

Pour faire cette étude, on va utiliser la deuxième méthode.

III-Valeurs propres de H

D'une façon plus générale, l'équation aux valeurs propres (9), peut s'écrire de la forme :

$$H | \varphi_{\nu}^i \rangle = E_{\nu} | \varphi_{\nu}^i \rangle \quad (12)$$

Où $| \varphi_{\nu}^i \rangle$ et E_{ν} sont respectivement les vecteurs propres et les valeurs propres de H. L'indice ν peut à priori être discret ou continu. L'indice i permet de distinguer les différents vecteurs propres associés à la même valeur propre E_{ν} .

Pour faire l'étude de l'équation (12), on va introduire les quantités suivantes :

-Les observables \hat{X} et \hat{P} définies par :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad (13)$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \quad (14)$$

On remarque que les observables \hat{X} et \hat{P} sont sans dimensions.

On a aussi :

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad (15)$$

L'hamiltonien H s'écrit alors :

$$H = \hbar\omega\hat{H} \quad (16)$$

Avec :

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad (17)$$

-Les opérateurs :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad (18)$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) \quad (19)$$

Ce qui revient à écrire:

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^+) \quad (20)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a) \quad (21)$$

L'opérateur \hat{H} de l'oscillateur s'écrit alors :

$$\hat{H} = aa^+ + \frac{1}{2} = a^+a - \frac{1}{2} \quad (22)$$

Car a et a^+ sont des opérateurs non hermétiques et sont adjoints l'un de l'autre.

Leur commutateur est :

$$[a, a^+] = 1 \quad (23)$$

Introduisons l'opérateur N défini par :

$$N = a^+a \quad (24)$$

On aura donc :

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2} \quad (25)$$

Et

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (26)$$

Les vecteurs propres de H sont donc aussi vecteurs propres de N et réciproquement. N est un opérateur hermétique et ses commutateurs avec a et a⁺ sont :

$$[N, a^+] = a^+ \quad (27)$$

$$[N, a] = -a \quad (28)$$

1. Valeurs propres de N

Soient v et $|\varphi_v\rangle$ les valeurs propres et vecteurs propres de N, on a donc :

$$N |\varphi_v\rangle = v |\varphi_v\rangle \quad (29)$$

D'après l'équation (26), les $|\varphi_v\rangle$ sont aussi vecteurs propres de H avec les valeurs propres $\hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right)$. Il s'agit donc de déterminer les valeurs que peut prendre v.

a. Propriétés des valeurs propres et des vecteurs propres de N

Si $|\varphi_v\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre v :

- v est nécessairement positive ou nulle.

- Si v=0, alors $a |\varphi_v\rangle = 0$

- Si v≠0, alors $a |\varphi_v\rangle$ est un vecteur non nul de norme $v\langle\varphi_v|\varphi_v\rangle$ et c'est un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre (v - 1).

- $a^+ | \varphi_\nu \rangle$ est un vecteur non nul, sa norme $(\nu + 1)\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu \rangle$ et c'est un vecteur propre de N correspondant à la valeur propre $(\nu + 1)$.

b. Spectre de N

Les valeurs propres ν de l'opérateur N sont positives ou nulles. Soit ν la valeur propre de N et $| \varphi_\nu \rangle$ le vecteur propre correspondant, on a :

$$N | \varphi_\nu \rangle = \nu | \varphi_\nu \rangle \quad (30)$$

ν ne peut être qu'un entier positif ou nul et les valeurs propres de N sont donc $n = 0, 1, 2, \dots$:

Comme

$$H = \hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (31)$$

On conclut que les valeurs propres de l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique sont donnés par :

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (32)$$

L'équation aux valeurs propres étant :

$$H | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle \quad (33)$$

L'énergie de l'oscillateur harmonique est donc quantifiée et ne peut pas prendre n'importe quelle valeur. De plus, sa plus faible valeur qui correspond à l'état fondamental ($n = 0$) n'est pas nulle mais égale à $\frac{\hbar \omega}{2}$.

2. Interprétation des opérateurs a et a^+

Soit $| \varphi_n \rangle$ l'état propre de H associée à la valeur propre

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (34)$$

- Par application de a : on passe à l'état propre associé à la valeur propre E_{n-1} telle que :

$$E_{n-1} = E_n - \hbar\omega \quad (35)$$

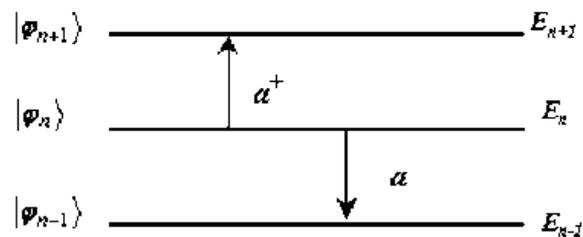
On dit qu'il y a annihilation d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$.

- Par application de a^+ : on passe à l'état propre associé à la valeur propre E_{n+1} telle que :

$$E_{n+1} = E_n + \hbar\omega \quad (36)$$

On dit qu'il y a création d'un quantum d'énergie $\hbar\omega$.

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



Opérateurs création et annihilation

IV. Etats propres de H

Nous avons vu dans III.1 que les états propres de l'hamiltonien H associés aux valeurs propres E_n sont les états propres $|\varphi_n\rangle$ de l'opérateur N associés aux valeurs propres n . N étant un opérateur hermétique à spectre discret, dont aucune des valeurs propres n n'est dégénérée, constitue à lui seul un E.C.O.C..

Ses états propres forment donc une base orthonormée complète $\{|\varphi_n\rangle\}$ et on a :

$$\langle \varphi_n | \varphi_{n'} \rangle = \delta_{nn'} \quad (37)$$

$$\sum |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \quad (38)$$

Pour déterminer les $|\varphi_n\rangle$ il faut résoudre l'équation aux valeurs propres :

$$N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$$

Au lieu d'effectuer cette résolution pour chaque entier n , nous allons montrer que la connaissance de l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$ nous permet d'atteindre tous les autres états $|\varphi_n\rangle$.

Pour chercher $|\varphi_0\rangle$ solution de l'équation $N|\varphi_0\rangle = 0$, il est plus simple d'utiliser les propriétés **III.1.a** et de résoudre l'équation :

$$a|\varphi_0\rangle = 0 \quad (39)$$

L'opérateur d'annihilation a en effet une structure plus simple que l'opérateur N .

On peut facilement, en utilisant les propriétés **III.1.a** et montrer que :

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \quad (40)$$

$$a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \quad (41)$$

Ces relations sont très importantes et sont à la base de toutes les propriétés de l'oscillateur harmonique. Donc on peut déduire toutes les $|\varphi_n\rangle$ à partir de l'état propre $|\varphi_0\rangle$ et on :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|\varphi_0\rangle \quad (42)$$

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

$$\langle\varphi_{n'}|a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n'n-1} \quad (43)$$

$$\langle\varphi_{n'}|a^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n'n+1} \quad (44)$$

$$\langle \varphi_{n'} | N | \varphi_n \rangle = n \delta_{n'n} \quad (45)$$

$$\langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\sqrt{n+1} \delta_{n'n+1} + \sqrt{n} \delta_{n'n-1}] \quad (46)$$

$$\langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle = i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} [\sqrt{n+1} \delta_{n'n+1} - \sqrt{n} \delta_{n'n-1}] \quad (47)$$

V. Fonctions propres de H

1. Fonction d'onde de l'état fondamental

La fonction d'onde de l'état fondamentale :

$$a | \varphi_0 \rangle = 0 \quad (48)$$

En représentation $\{ | x \rangle \}$ on a :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}) \quad (49)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{x}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} + i \frac{p}{\sqrt{\hbar m\omega}} \right) \quad (50)$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \quad (51)$$

Donc l'équation (50) s'écrit dans cette représentation :

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0 \quad (52)$$

Où $\varphi_0(x) = \langle x | \varphi_0 \rangle$

On obtient une équation différentielle du premier ordre dont la solution générale est :

$$\varphi_0(x) = C \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (53)$$

C est une constante d'intégration qui s'obtient en normalisant la fonction d'onde $\varphi_0(x)$. On trouve :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0^*(x) \varphi_0(x) dx = 1 \quad (54)$$

$$|C| = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \quad (55)$$

Comme $\varphi_0(x)$ est définie à une phase près, on peut choisir la constante C réelle. La fonction d'onde associée à l'état fondamental $|\varphi_0\rangle$ s'écrit donc :

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar} x^2\right) \quad (56)$$

2. Fonctions d'onde associés aux autres états $|\varphi_n\rangle$

Pour obtenir les fonctions $\varphi_0(x)$ associées aux autres états stationnaires $|\varphi_n\rangle$, il suffit d'utiliser l'expression suivante:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |\varphi_0\rangle$$

L'opérateur a^+ s'écrit dans la représentation $\{|x\rangle\}$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right)$$

On obtient alors

$$\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle \quad (57)$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x | (a^+)^n \varphi_0 \rangle \quad (58)$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n \varphi_0(x) \quad (59)$$