



FILIERE SMC :(S4)

COURS DE MECANIQUE QUANTIQUE

Présenté par :

Le Professeur Farid BENABICHA

Année universitaire 2019/2020

TABLE DES MATIERES

Chapitre 1 : Les notions de Mathématiques utiles en M.Q

Chapitre 2 : Les origines de la M.Q

Chapitre 3 : L'équation de Schrödinger-Application

Chapitre 4 : Le formalisme Mathématique de la M.Q

Chapitre 5 : Les postulats de la M.Q

Chapitre 6 : L'oscillateur harmonique à une dimension

Chapitre 1

Les Notions de Mathématiques utiles en Mécanique Quantique

I-Série de Fourier

1-Fonctions périodiques

Une fonction $f(x)$ est dite périodique s'il existe $L \in \mathbb{R}^*$ tel que : $\forall x$

$$\text{on a } f(x + L) = f(x)$$

- ❖ L est appelée période de $f(x)$
- ❖ nL ($n \in \mathbb{Z}^*$) sont aussi périodes de $f(x)$
- ❖ La plus petite période > 0 s'appelle : période fondamentale (P.F)

Exemples:

Fonctions trigonométriques: $\cos 2\pi \frac{x}{L}$; $\sin 2\pi \frac{x}{L}$

Exponentielles périodiques : $e^{i\alpha x}$ avec $\alpha \in \mathbb{R}^*$

$$e^{i\alpha(x+L)} = e^{i\alpha x} \Rightarrow e^{i\alpha L} = 1 = e^{i2n\pi} \Rightarrow L = \frac{2n\pi}{\alpha}$$

$$\text{La P.F est } L = \frac{2\pi}{\alpha} \Rightarrow e^{i\frac{2x\pi}{L}} = \cos 2\pi \frac{x}{L} + i \sin 2\pi \frac{x}{L}$$

2-Développement en série de Fourier

a - Définition

Soit $f(x)$, une fonction périodique de (P.F) L . Elle peut se mettre sous la forme :

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

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

Exemple d'application :

Développer en série de Fourier la fonction périodique ($L = 2\pi$) suivante :

$$f(x) = 1 \quad \text{pour} \quad 0 \leq x \leq \pi \quad \text{et} \quad f(x) = 0 \quad \text{pour} \quad \pi \leq x \leq 2\pi$$

b - Egalité de Bessel-Parseval :

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

II-Transformation de Fourier

1-Définition

Soit $f(x)$ une fonction quelconque et soit $f_L(x)$ une fonction périodique de (P.F) L, qui coïncide avec $f(x)$ sur l'intervalle $[-L/2, L/2]$; $f_L(x)$ peut être développée en série de Fourier :

$$f_L(x) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} C_n e^{ik_n x} \quad \text{avec} \quad k_n = \frac{2n\pi}{L}$$

Les coefficients C_n sont donnés par :

$$C_n = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} f(x) e^{-ik_n x} dx$$

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

Or $k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{L} \Rightarrow \frac{1}{L} = \frac{k_{n+1} - k_n}{2\pi}$

Quand L tend vers l' ∞ :

$k_{n+1} - k_n$ devient infiniment petit et tend vers dk ;

$f_L(x)$ tend vers $f(x)$ et $\sum_{-\infty}^{+\infty}$ tend vers $\int_{-\infty}^{+\infty}$

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

$f(x)$ et $\bar{f}(k)$ sont dites transformées de Fourier (T.F) l'une de l'autre.

En mécanique quantique, du fait que: $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ ($d\mathbf{k} = \frac{d\mathbf{p}}{\hbar}$) (à admettre pour le moment), on utilise ces relations sous la forme suivante:

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

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

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

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

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

2-Propriétés

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

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

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

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

\diamond Si $f^{(n)}$ désigne la dérivée $n^{\text{ième}}$ de la fonction f , des dérivations successives sous le signe somme donne :

$$F[\psi^{(n)}(x)] = \left(\frac{ip}{\hbar}\right)^n \bar{\psi}(p) \quad \text{et} \quad \bar{\psi}^{(n)}(p) = F\left[\left(-\frac{ix}{\hbar}\right)^n \psi(x)\right]$$

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

3-Formule de Parseval-Plancherel

La transformée de Fourier conserve la norme :

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

4-Exemples

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

❖ **Fonction créneau:** $\psi(x) = \frac{1}{a}$ pour $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ et $\psi(x) = 0$ pour $|x| > \frac{a}{2}$

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

❖ **Fonction Gaussienne:** $\psi(x) = e^{-\frac{x^2}{a^2}}$

On obtient
$$\bar{\psi}(p) = \frac{a}{\sqrt{2\hbar}} e^{-\left(\frac{p^2 a^2}{4\hbar^2}\right)}$$

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

5-Transformation de Fourier dans l'espace à 3 D

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

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \bar{\psi}(\vec{p}) e^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} d^3p$$

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

Les propriétés énoncées plus haut se généralisent aisément à 3 D

III-La fonction δ de Dirac

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

1-Définition de δ

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

et $\delta^{(\varepsilon)}(x) = 0$ pour $|x| > \frac{\varepsilon}{2}$

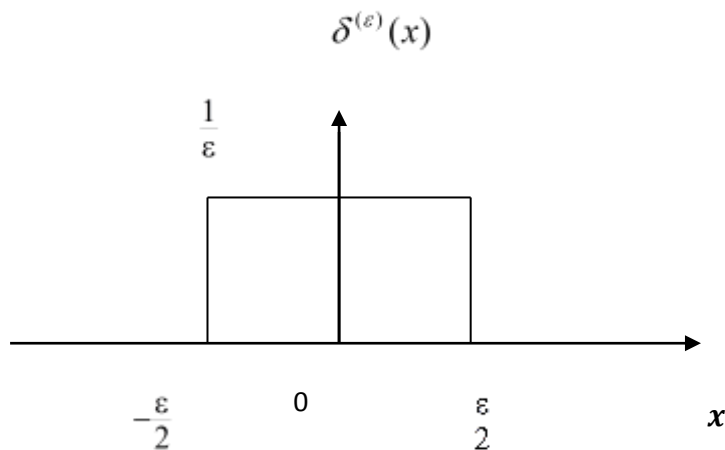


Figure : créneau de largeur ε , de hauteur $\frac{1}{\varepsilon}$, centré en $x = 0$

Soit $f(x)$ une fonction quelconque définie en $x = 0$

Calculons l'intégrale : $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta^{(\varepsilon)}(x)dx$

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

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

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

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

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

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0) \quad (1)$$

Soit
$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty \text{ en } x_0 \\ 0 \text{ ailleurs} \end{cases}$$

2-Fonctions tendant vers δ

$$\frac{1}{\varepsilon} e^{-\frac{|x|}{\varepsilon}} \quad \frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\varepsilon^2}} \quad \frac{1}{\pi} \frac{\sin(\frac{x}{\varepsilon})}{x}$$

3-Propriétés de δ

Les propriétés que nous allons énoncer se démontrent facilement à partir de la définition (1) : On multiplie les deux membres des égalités ci-dessous par une fonction $f(x)$, on intègre, et on montre que les résultats obtenus sont bien égaux.

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

4-Transformée de Fourier de δ

$$\text{❖ } F[\delta(x - x_0)] = \bar{\delta}x_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) e^{-ipx/\hbar} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx_0/\hbar}$$

Et en particulier:

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

La transformée de Fourier inverse est:

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

Et en particulier:

$$\diamond \bar{F}[\bar{\delta_0}(p)] = \delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ixp/\hbar} dp$$

5-Dérivée de δ

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

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

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

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

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

6-Propriétés de δ'

$$\diamond \delta'(-x) = -\delta'(x) \quad \text{et} \quad x \delta'(x) = -\delta(x)$$

Ou d'une façon générale:

$$\diamond \delta^{(n)}(-x) = (-1)^n \delta^{(n)}(x) \quad \text{et} \quad x \delta^{(n)}(x) = -n \delta^{(n-1)}(x)$$

7-La fonction δ dans l'espace à 3 D

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

$$\int \delta(\vec{r}) f(\vec{r}) d^3r = f(\vec{0})$$

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

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

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

Chapitre 2

Les origines de la mécanique quantique

I-Introduction

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

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

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

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

Vers la fin du 19^{ème} siècle, certains phénomènes nouveaux n'ont pas pu être expliqués dans le cadre de la physique classique, et notamment :

Le rayonnement du corps noir ; L'effet photoélectrique ; l'effet Compton et le spectre des atomes.

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

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

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

II-Aspect corpusculaire du rayonnement

1- Rayonnement du corps noir

a- Définition

Un corps noir est par définition un corps absorbant intégralement les radiations qu'il reçoit.

b- Expérience

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

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

Le profil de la densité d'énergie lumineuse est représenté sur la figure 1

($U_{\nu} d\nu$ est la quantité d'énergie émise par unité de volume, par les fréquences situées entre ν et $\nu + d\nu$.)

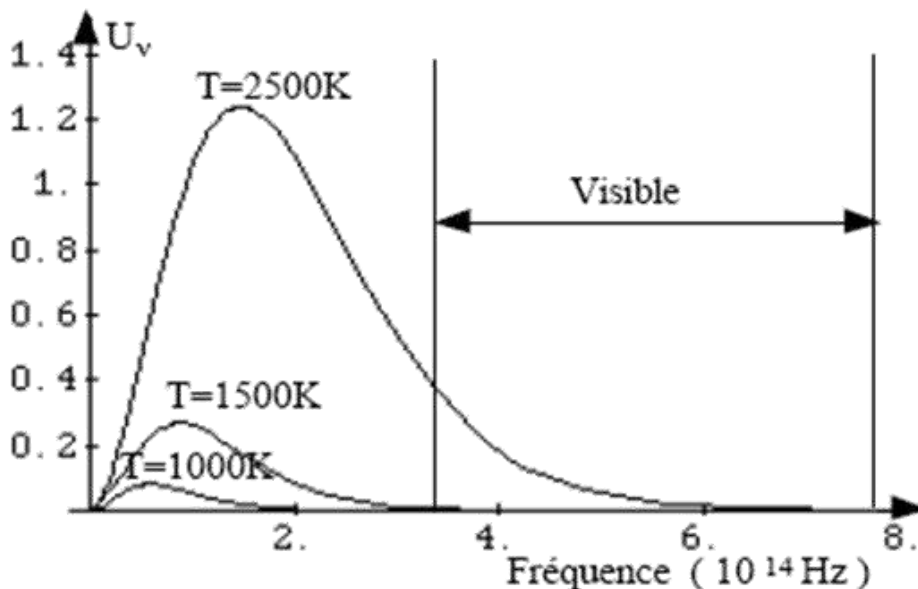


Figure 1: Spectre d'émission d'un corps porté à haute température (corps noir).

c-Interprétation classique

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

$$U_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \quad \text{Où } k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \text{ est la constante de Boltzmann et}$$

$c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ est la vitesse de la lumière.

La théorie de R-J comme le montre la figure 1, n'expliquait que le début de la courbe, elle n'expliquait pas le maximum, ni la décroissance exponentielle aux fréquences élevées. De plus, la densité totale de l'énergie émise est infinie :

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

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

d-Hypothèse de Planck (1900)

Afin d'expliquer le rayonnement du corps noir, Planck émit l'hypothèse suivante :

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

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

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

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

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

On retrouve le modèle de R-J.

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

$$u(T) = \int_0^{\infty} U_\nu(T) d\nu = \frac{8}{15} \frac{\pi^5 k_B^4}{c^3 h^3} T^4 = a T^4 \quad (a = 7,56 \cdot 10^{-16} \text{ JK}^{-4} \text{ m}^{-3})$$

Cette loi est connue sous le nom de: loi de Stefan, elle est bien vérifiée expérimentalement.

Si λ_m est la longueur d'onde correspondant au maximum de densité d'énergie à la température T ; on obtient : $\lambda_m T = \text{cte}$. Cette relation est connue sous le nom de :

loi de Wien.

En conclusion :

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

Remarque :

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

2-Effet photoélectrique

Cet effet, découvert par Hertz en 1887, ne trouvait pas d'explication dans le cadre des théories classiques.

a-Expérience

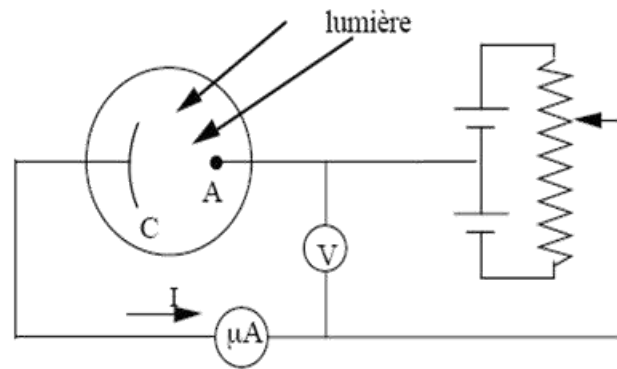


Figure 2 : Dispositif expérimental

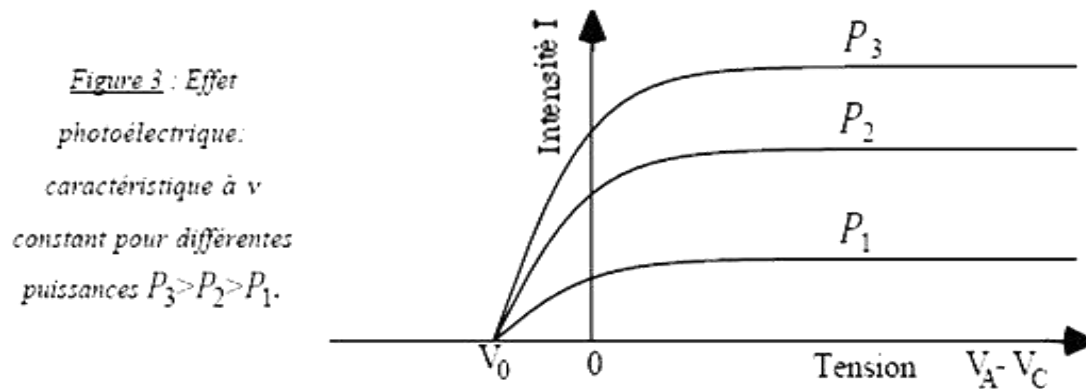
La cathode portée à un potentiel V_C reçoit un rayonnement excitateur de fréquence ν et de puissance P . L'anode portée à un potentiel V_A recueille les électrons émis par la cathode

L'expérience consiste à mesurer l'intensité du courant qui traverse la cellule photoélectrique en fonction des trois paramètres expérimentaux:

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

Expérience n° 1

La cathode est en zinc. Le rayonnement est de fréquence ν . On mesure le courant I passant dans le microampèremètre en fonction de V pour différentes puissances P de rayonnement (Courbe de la figure 3).

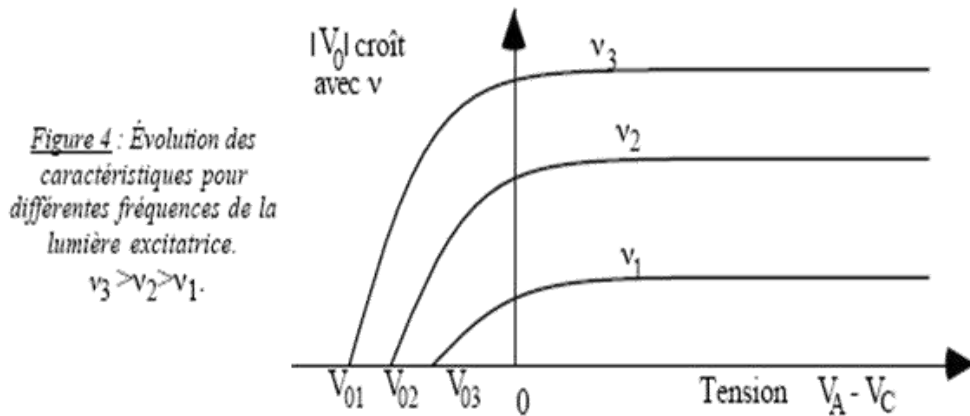


- ❖ Pour V suffisamment élevée, I atteint une valeur de saturation I_S proportionnelle à P .
- ❖ Pour $V_0 < V < 0$, aucun courant ne passe. V_0 , appelée contre tension maximale ou potentiel d'arrêt, est indépendante de la puissance du rayonnement incident.
- ❖ Il existe entre V_0 et le domaine de saturation, une région intermédiaire où I croît progressivement avec V .

Expérience n° 2

Sans modifier la nature de la cathode, on fait varier la fréquence ν du rayonnement incident.

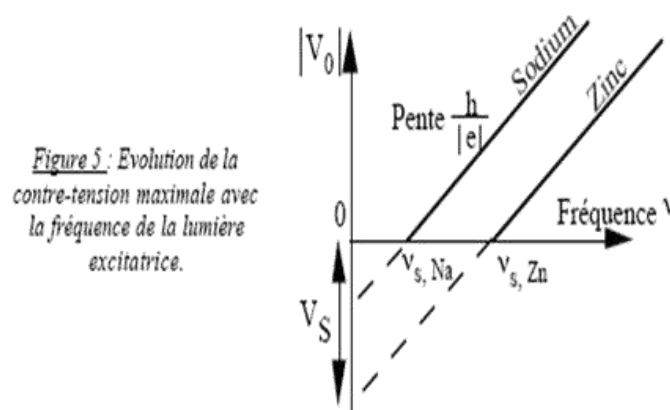
On obtient la courbe de la figure 4.



- ❖ Si la fréquence ν est inférieure à une fréquence ν_s appelée fréquence de seuil, aucun courant ne traverse la cellule photoélectrique, $\forall P$.
- ❖ Si $\nu > \nu_s$ le courant passe et la contre tension maximale varie linéairement avec la fréquence ν .

Expérience n° 3

- ❖ On change la nature de la cathode, en remplaçant le zinc par du sodium puis du nickel. La fréquence de seuil ν_s varie mais la pente de $|V_0|$ en fonction de ν se trouve être indépendante de la nature du métal (Courbe de la figure 5).



Expérience n° 4

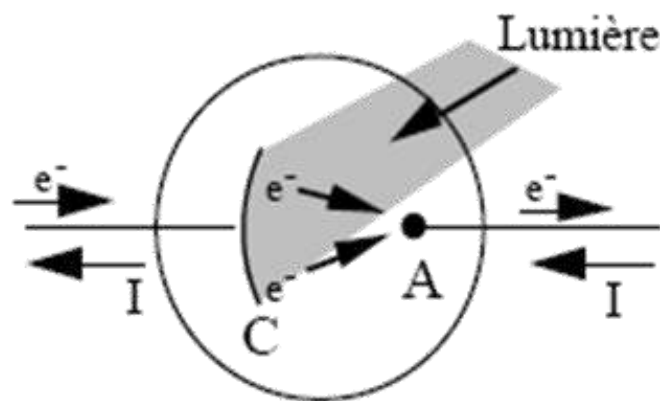
- ❖ On mesure le temps qui s'écoule entre le début de l'éclairement et le passage du courant. Il est inférieur à 10^{-9} s. Le phénomène est instantané.

b- Interprétation de l'effet photoélectrique

Certains aspects des expériences s'interprètent aisément dans le cadre de la théorie classique de l'électromagnétisme.

- Le phénomène de passage du courant

L'onde électromagnétique transporte de l'énergie. Elle la communique aux électrons de la cathode et les en éjecte. Les électrons accélérés dans le champ électrique régnant entre la cathode et l'anode atteignent cette dernière et assurent le passage du courant



- Saturation du courant et son évolution avant saturation

Le régime qui précède la saturation s'explique par ce qu'on appelle classiquement les charges d'espace.

Les électrons sont éjectés de la cathode et accélérés dans le champ électrique. Ils sont rapidement évacués si le champ électrique, et donc V est fort. Ils sont évacués peu rapidement si V est faible. Dans ce dernier cas de nombreux électrons se trouvent en permanence entre l'anode et la cathode, repoussent les nouveaux électrons émis et contribuent à une limitation du courant électrique.

Si V est assez fort, tous les électrons émis par la cathode atteignent l'anode, c'est le régime de saturation. Il ne sert plus à rien d'augmenter encore la différence de potentiel.

- Il est par contre impossible d'expliquer la fréquence de seuil ν_s et la contre tension maximale V_0 par les lois classiques de l'électromagnétisme.

Comment en effet comprendre qu'un rayonnement de très grande puissance P , apportant une très grande quantité d'énergie par unité de temps, mais de fréquence $\nu < \nu_s$, ne puissent pas arracher les électrons.

Alors qu'un rayonnement de fréquence $\nu > \nu_s$ mais de très faible puissance peut le faire instantanément? Comment se fait-il que l'accumulation d'énergie d'un rayonnement $\nu < \nu_s$ soit inefficace ?

Interprétation quantique :

La théorie correcte de l'effet photoélectrique a été formulée par Einstein.

Il va plus loin que Planck en supposant que non seulement les échanges d'énergie entre lumière et matière se font par « quantum » indivisible $h\nu$, mais que la lumière est formée de grains d'énergie $h\nu$ qu'on appelle « photons » ; **l'énergie du photon est $h\nu$, sa vitesse est c**

On peut alors considérer, l'effet photoélectrique comme un problème de choc photon-électron, avec annihilation du photon (il s'agit d'un choc inélastique).

En écrivant la conservation de l'énergie dans ce choc, on obtient :

$$h\nu = w_s + T$$

Où w_s est le travail de sortie du métal irradié (énergie d'extraction de l'électron).

Ainsi, l'énergie du photon se sépare en deux parties :

- w_s qui est absorbée par le métal pour libérer l'électron.
- L'excédent $h\nu - w_s = T$ qui est communiquée à l'électron sous forme d'énergie cinétique.

Essayons de vérifier quelques lois de l'effet photoélectrique en utilisant cette théorie :

❖ Si on pose $w_s = h\nu_s$; l'électron sera émis avec une énergie cinétique

$$T = h(\nu - \nu_s) \text{ et comme } T \geq 0:$$

- $\nu < \nu_s$: $I = 0$ (pas d'effet photoélectrique)
- $\nu > \nu_s$: $I \neq 0$
- $\nu = \nu_s$: (l'énergie du photon permet juste d'extraire l'électron)

On montre en utilisant le théorème de l'énergie cinétique qu'il existe un potentiel d'arrêt V_0 ($I = 0$) tel que: $V_0 = \frac{h}{e} (\nu - \nu_s)$

En conclusion :

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

Application :

L'effet photoélectrique a plusieurs applications dans notre vie courante :

La mesure des intensités lumineuses en photométrie ; le comptage d'objets opaques passant devant la cellule (visiteurs d'une exposition, par exemple) ; la mise en marche de dispositifs mécaniques (escaliers, portes).

Exercice d'application:

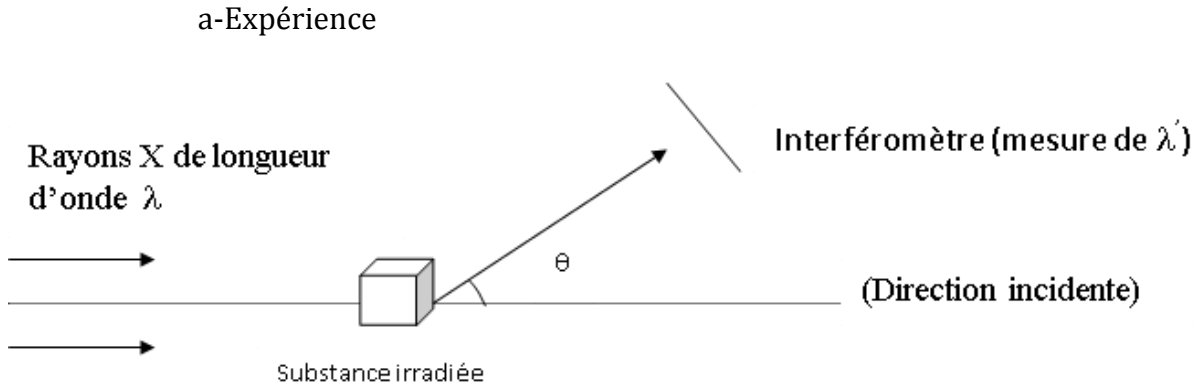
Une cellule photoélectrique possède une photocathode au césium. Elle est éclairée par une radiation monochromatique de longueur d'onde

$\lambda = 0.425 \mu\text{m}$. La puissance captée par la photocathode est $P = 1 \text{ W}$. Les mesures donnent alors : $I_s = 2 \text{ mA}$ et $V_a = 1 \text{ Volt}$. Déterminer :

- 1- L'énergie cinétique maximale de sortie des électrons photo émis.
- 2- Le travail d'extraction W_s du césium, en déduire ν_s .
- 3- Le nombre de photons N captés et le nombre d'électrons n émis par seconde par la cathode. En déduire le rendement quantique $\eta = \frac{n}{N}$, conclure.

3-Effet Compton (1923)

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



Un faisceau de rayons X de longueur d'onde λ , est envoyé sur une substance (contenant un certain nombre d'électrons libres (Calcite, Aluminium)), qui le renvoie dans toutes les directions.

On isole une radiation dans la direction θ et on mesure sa longueur d'onde λ' à l'aide d'un interféromètre. On trouve : $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = f(\theta)$.

b-Interprétation théorique

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

Einstein avait montré dans un référentiel R, que pour une particule de masse au repos m_0 et de vitesse v proche de la vitesse de la lumière c , on a :

○ $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$ Exemple : pour $v = 0.995 c \Rightarrow m = 10 m_0$

- $E = mc^2 = E_0 + T$ où E est l'énergie totale, $E_0 = m_0c^2$ est l'énergie au repos et T est l'énergie cinétique.
- $\vec{p} = m\vec{v} = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\vec{v}$ est la quantité de mouvement de la particule.
- $E = mc^2 = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}$

Dans le cas du photon : $m_0 = 0 \Rightarrow E = pc = h\nu \Rightarrow p = \frac{h}{\lambda}$

Remarque : Une particule est relativiste si :

$$v > 0.14 c$$

$$\text{ou } T > \frac{E_0}{100} \text{ (5 Kev pour un électron et 10 Mev pour un proton)}$$

$$\text{ou } p > 0.14 \frac{E_0}{c} \text{ (70 Kev/c pour un électron et 130 Mev/c pour un proton).}$$

- **Interprétation :** La diffusion est assimilée à un choc élastique.

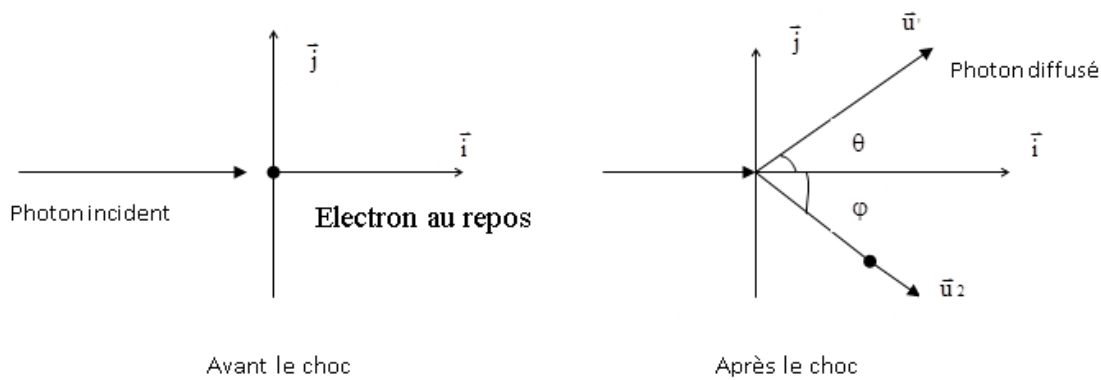


Figure : Collision entre un photon et un électron

Pour le Photon:

$$E = h\nu$$

$$E' = h\nu'$$

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

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

Pour l'électron:

$$E_1 = m_0 c^2 \quad E_2 = m c^2 = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} = m_0 c^2 + T_2$$

$$\vec{p}_1 = \vec{0} \quad \vec{p}_2 = p_2 \vec{u}_2$$

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

$$\text{La conservation de } \vec{p} \text{ donne : } \vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_2 \quad (1)$$

$$\text{La conservation de l'énergie donne : } E + E_1 = E' + E_2 \quad (2)$$

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

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

$$\text{On trouve : } \Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \theta) = f(\theta) \quad (3)$$

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

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

$\lambda_c = \frac{h}{m_0 c}$ est la longueur d'onde pour laquelle l'énergie du photon incident est égale à l'énergie au repos de l'électron.

$$\text{En effet : } h\nu = \frac{hc}{\lambda_c} = hc \frac{m_0 c}{h} = m_0 c^2$$

L'ordre de grandeur de cette quantité montre que l'effet ne sera relativement visible que dans le domaine des faibles longueurs d'ondes (de l'ordre de 1 Å) : c'est pourquoi l'on parle de diffusion Compton essentiellement pour les rayons X. Il est remarquable que tous les résultats expérimentaux soient parfaitement interprétés par la formule (3), justifiant ainsi l'existence d'un caractère corpusculaire du rayonnement.

En conclusion :

L'effet Compton vérifie expérimentalement que le photon possède une impulsion

$$\mathbf{p} = \frac{h\nu}{c} \cdot$$

III-Aspect ondulatoire de la matière

1-Hypothèse de De Broglie

Un caractère ondulatoire pouvait-être associé à des particules matérielles en plus de leur caractère corpusculaire.

Ainsi à un électron (\vec{p}, E), De Broglie a associé une onde (\vec{k}, ν) où ν est la fréquence

($\nu = \frac{\omega}{2\pi}$) ; $\vec{k} = k\vec{u}$ est le vecteur d'onde, \vec{u} est un vecteur unitaire porté par la direction de propagation de l'onde, avec $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, λ est la longueur d'onde. Ensuite, il lui (l'électron) a appliqué les mêmes relations que celles du photon à savoir:

$$E = \hbar\omega \quad \left(\hbar = \frac{h}{2\pi} \right) \quad \text{et} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

Donc à chaque particule, on associe une onde de longueur d'onde λ définie par : $\lambda = \frac{h}{m_0\nu}$ (particule non relativiste) et $\lambda = \frac{h}{p}$ (particule relativiste).

Exemples :

❖ Domaine macroscopique

- La terre ($m_t = 6 \cdot 10^{24}$ Kg ; $\nu = 3 \cdot 10^4$ m / s) : $\lambda = 0.37 \cdot 10^{-62}$ m
- Un grain de poussière ($m_{gp} = 10^{-15}$ g ; $\nu = 10^{-3}$ m/s): $\lambda = 6.6 \cdot 10^{-16}$ m

Ces longueurs d'ondes sont impossibles à mesurer par les techniques actuelles.

❖ Domaine microscopique

- Un électron ($m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ Kg ; $\nu = 6 \cdot 10^6$ m / s): $\lambda = 0.12 \cdot 10^{-9}$ m = 1.2 Å
- Un neutron « dit thermique » ($m_n = 1.67 \cdot 10^{-27}$ Kg ; T = 300 K): $\lambda = 1.78$ Å

Ces longueurs d'ondes sont de l'ordre de celles des rayons X qu'on sait mesurer.

On remarque donc d'après ces exemples que la possibilité de détecter ces ondes apparaît avec l'exploration du monde microscopique.

2-Confirmation expérimentale de l'hypothèse de De Broglie

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

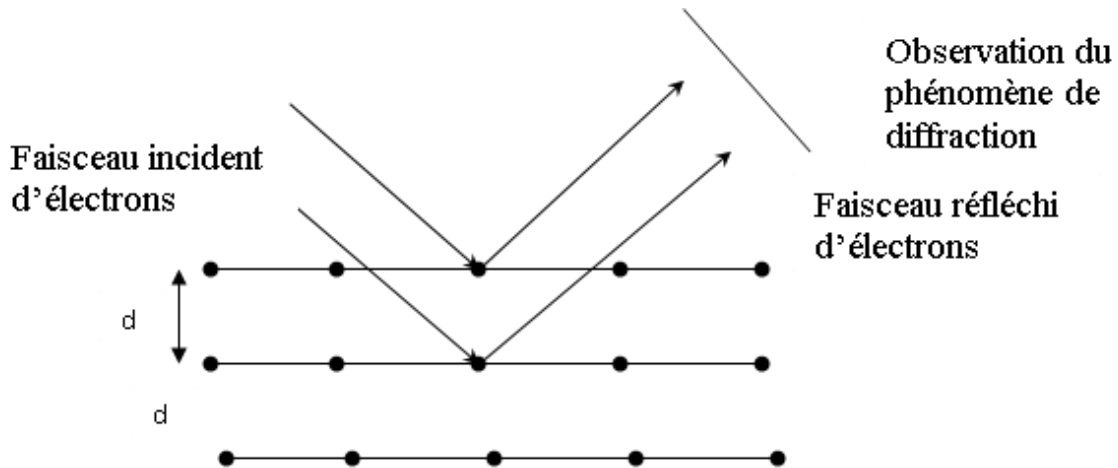


Figure : diffraction d'une onde sur les plans réticulaires d'un cristal

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 :

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

La longueur d'onde associée à ces électrons est :

$$\lambda_{th} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2meV}}, \text{ Ainsi pour l'électron ; } \lambda_{th} = \frac{12,3}{\sqrt{V}} \text{ Å}$$

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

Pour des tensions variant entre 10^4 et $2 \cdot 10^4$ volts, correspondant à des longueurs d'ondes de 0.1 Å à 0.07 Å , la vérification s'effectue à 10^{-3} près.

3-Quantification de la matière (atome d'hydrogène)

a-Modèle classique (Rutherford 1911)

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

(Le système = $(e^- + e^+)$). Le noyau est au repos, l'électron de vitesse \vec{v} et de masse m_e est soumis à une force électrique $\vec{F} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \vec{e}_r$.

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

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

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

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

Quand l'électron tourne, il rayonne, donc E diminue et par conséquent r diminue et l'électron finira par tomber sur le noyau, ce qui rend l'atome d'hydrogène instable.

Or, d'après l'expérience, l'atome d'hydrogène est un système très stable et ne peut être détruit que par ionisation (séparation de l'électron et du noyau), ce qui est tout le contraire d'une chute de l'électron.

Ce modèle classique est donc non valable pour expliquer ces phénomènes atomiques.

b-Modèle semi quantique

A la suite des découvertes de l'effet photoélectrique, de l'effet Compton et des explications théoriques d'Einstein et Planck, Bohr (1913) appliqua la théorie quantique aux échanges d'énergie électromagnétique de l'atome. Ses idées peuvent se grouper en deux postulats :

➤ **1^{er} postulat :**

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

$L = m_e v r n = n \hbar$ où n est un entier d'où $r_n = n \frac{\hbar}{m_e v}$. Il y a donc existence de trajectoires privilégiées pour $n = 1, 2, \dots$ (appelées orbites) et comme $E_n = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}$,

il y a donc quantification de l'énergie, le spectre d'énergie est E_1, E_2, \dots

➤ **2^{ième} postulat :**

Dans sa trajectoire, l'électron ne peut ni émettre, ni absorber une radiation. Il ne peut le faire que s'il passe d'une trajectoire à une autre, il y a en même temps :

❖ soit émission du quantum $h\nu_{n,p} = E_n - E_p$ si $E_n > E_p$

❖ soit absorption d'un quantum $h\nu_{p,n} = E_p - E_n$ si $E_n < E_p$

En utilisant le premier postulat, on montre que:

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

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

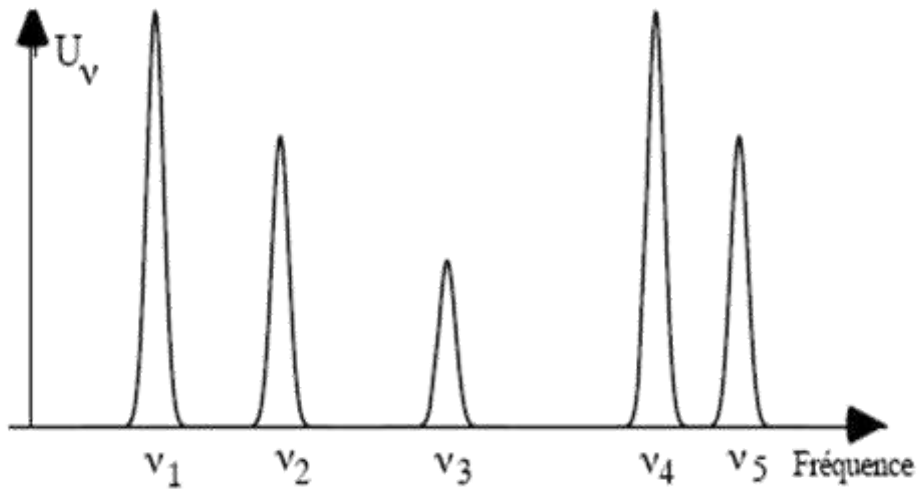
Cette relation vérifie bien l'expérience, notamment les expériences de Balmer (1885), la lumière émise par un tube rempli d'hydrogène gazeux et soumis à une décharge électrique, constitue un spectre de raies, les fréquences observées correspondantes sont bien représentées par la formule ci-dessus ($p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

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

Le spectre d'émission des atomes est donc un spectre de raies.

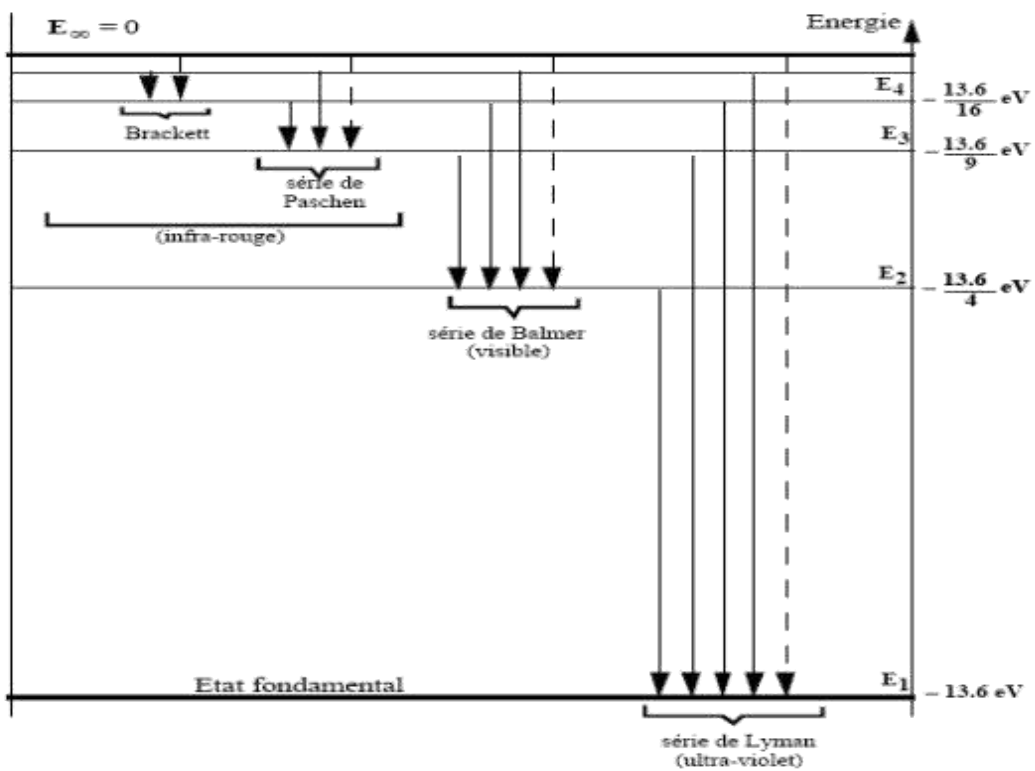
Ceci est une autre preuve de la discontinuité de l'énergie du fait que l'électron ne peut avoir que certaines énergies discrètes.

Un spectre typique d'émission de raies d'une lampe à décharge est représenté sur cette figure.



Le rayonnement n'est émis que sur certaines fréquences particulières caractéristiques de l'élément.

La figure ci-dessous donne les transitions spectrales dans l'atome d'hydrogène



IV-Principe de complémentarité

On a vu que le rayonnement comme la matière présente un double aspect : ondulatoire et corpusculaire (C'est la dualité onde- corpuscule).

Ces deux aspects sont liés entre eux par les relations de Planck-Einstein :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \qquad \text{et} \qquad E = \hbar \omega$$

Le principe de complémentarité de Bohr (1928) illustre l'impossibilité d'observer à la fois le caractère corpusculaire (localisé) et ondulatoire (étendu) de la matière.

Le principe de complémentarité peut-être comparé à l'impossibilité de lire simultanément le recto et le verso d'une même page.

Chapitre 3

Equation de Schrödinger

Etude de quelques systèmes quantiques à une dimension

I-Fonction d'onde associée à une particule

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

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

Ceci, nous incite à remplacer la notion de trajectoire d'une particule (MC) par la notion de probabilité de présence dP de trouver la particule à un instant donné dans un élément de volume d^3r entourant le point \vec{r} (MQ).

Soit $dP(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ où $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t)$

est interprétée comme une densité de probabilité de présence.

Il est bien évident que : $\int_{\text{espace}} dP(\vec{r}, t) = \int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$ (1) \Rightarrow

$\psi(\vec{r}, t)$ doit être de carré sommable ($\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ est finie)

et normalisée de façon à satisfaire à l'équation (1).

$\psi(\vec{r}, t)$ est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence. Elle contient toutes les informations qu'il est possible d'avoir sur une particule.

1 - Onde plane

Une onde plane est une onde de la forme : $\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}$

ψ_0 est l'amplitude ; $\omega = \frac{2\pi}{T} = 2\pi\nu$ est la pulsation ; $\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$ est le vecteur d'onde.

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

La représentation de l'onde de De Broglie par une telle onde n'est pas valable du fait qu'elle n'est pas de carré sommable. En effet :

$$\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = |\psi_0|^2 \int_{\text{espace}} d^3r = \infty$$

2 - Paquet d'ondes

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

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

où $f(\vec{k})$ est le facteur de forme de l'onde.

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

On montre que

$$\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \text{ est finie}$$

Ce paquet d'ondes représentera en MQ la particule et permettra d'obtenir toutes les informations utiles sur le système physique constitué par cette particule.

3 - Vitesse de phase – Vitesse de groupe

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

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

Pour un milieu non dispersif : $v_\varphi = ct \quad \forall \quad \omega$ et $v_\varphi = v_g$

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

Exemples :

▪ Cas du photon : $\omega = kc$ et $v_\varphi = v_g = c$

▪ Cas d'une particule libre (énergie purement cinétique) : $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$

$v_\varphi = \frac{\hbar k}{2m}$ et $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} = v$. La vitesse de groupe du paquet d'onde est donc égale à la vitesse classique de la particule.

4 - Principe d'incertitude d'Heisenberg

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

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$$

On remarque que si Δx tend vers 0 alors Δp_x tend vers l'infini et réciproquement si Δp_x tend vers 0 alors Δx tend vers l'infini.

C'est-à-dire, si on cherche à mesurer la position avec une grande précision (incertitude très petite), il serait impossible de définir sa vitesse avec une incertitude définie. Cette impossibilité n'est pas technique mais fondamentale et constitue le principe d'incertitude d'Heisenberg (1927).

La généralisation à 3 dimension s'écrit : $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$ $\Delta y \Delta p_y \geq \hbar$

$\Delta z \Delta p_z \geq \hbar$; une quatrième relation s'écrit : $\Delta E \Delta t \geq \hbar$

Pour bien montrer cette impossibilité de mesurer dans la même expérience les caractères corpusculaires d'une particule (\vec{r} et t) et les caractères ondulatoires

($\lambda = \frac{h}{p}$ et $v = \frac{E}{h}$) prenons l'exemple suivant :

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

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

Exemple :

Un corpuscule de masse m oscille entre deux parois, avec une vitesse $v = cte$

($v = 2.3 \cdot 10^6$ m/s). La distance entre les deux parois est $2a$.

- Si $\Delta x = a$, quelle est Δv ? Quelle est ΔE_c ?
- **Application :**
 - Un électron avec $2a = 10 \text{ \AA}$; $m_e = 9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
 - Une balle de ping-pong avec $2a = 3 \text{ m}$; $m_b = 1 \text{ g}$

II-Equation de Schrödinger

C'est l'équation de base de la mécanique quantique, elle résulte de l'application de l'équation générale de propagation des ondes planes ($\Delta\psi - \varepsilon\mu \frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0$)

au mouvement de l'onde associée à une particule.

1-Conditions imposées

Cette équation doit :

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

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

2 -Etablissement de l'E-S dépendante du temps

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

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

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

$$\text{on posera : } F(\vec{p}) = \frac{1}{\hbar^3(2\pi)^{3/2}} f\left(\frac{\vec{p}}{\hbar}\right) \quad \text{d'où } \psi(\vec{r}, t) = \int F(\vec{p}) e^{-i(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar} d^3p$$

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

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

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

Si la particule est soumise à un champ de forces :

$$\vec{F} = -\overrightarrow{\text{grad}}V(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla}V(\vec{r}, t)$$

$V(\vec{r}, t)$ est l'énergie potentielle de la particule. Son énergie totale serait :

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

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

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

En général, on écrit cette équation sous la forme : $H\psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$

Où H est l'opérateur Hamiltonien défini par : $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}, t)$

Principe de correspondance :

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

et l'équation de Schrödinger : $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r}, t)$

On peut remarquer les correspondances suivantes :

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

Règles de formation de l'E-S d'un système quantique :

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

Exemple : Le mouvement d'une particule libre dans un plan (xOy).

3- E-S indépendante du temps

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

$\frac{dV(\vec{r},t)}{dt} = 0 \Leftrightarrow V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$. La fonction d'onde doit vérifier dans ce cas l'équation :

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

Cherchons s'il existe des solutions de cette équation de la forme :

$$\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) \chi(t)$$

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

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

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

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

Après la résolution de l'équation : $i\hbar \frac{d\chi(t)}{\chi(t)} = E$

On trouve $\psi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}) e^{-iEt/\hbar}$ (1)

Avec $\varphi(\vec{r})$ solution de l'E-S indépendante du temps :

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

Une fonction d'onde de la forme (1) est appelée solution stationnaire de l'équation de Schrödinger. Elle conduit à une densité de probabilité indépendante du temps

($|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\varphi(\vec{r})|^2$).

L'équation (2) peut s'écrire : $\mathbf{H} \varphi(\vec{r}) = \mathbf{E} \varphi(\vec{r})$ (3)

où H est l'opérateur Hamiltonien tel que : $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$

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

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

- ❖ Doivent être de carré sommable.
- ❖ Doivent être continues
- ❖ Leurs dérivées doivent être continues si le potentiel est fini.

4- Superposition des états stationnaires

Les états stationnaires de la particule ont donc pour fonction d'onde :

$$\psi_n(\vec{r}, t) = \varphi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t / \hbar}$$

Mais, on sait que toute combinaison linéaire de cette fonction est aussi solution de l'équation de Schrödinger, ce qui donne :

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\vec{r}, t) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r}) e^{-iE_n t / \hbar}$$

où les c_n sont des coefficients complexes, à $t = 0$ on a $\psi(\vec{r}, 0) = \sum_n c_n \varphi_n(\vec{r})$

III-Etude de quelques systèmes quantiques à une dimension

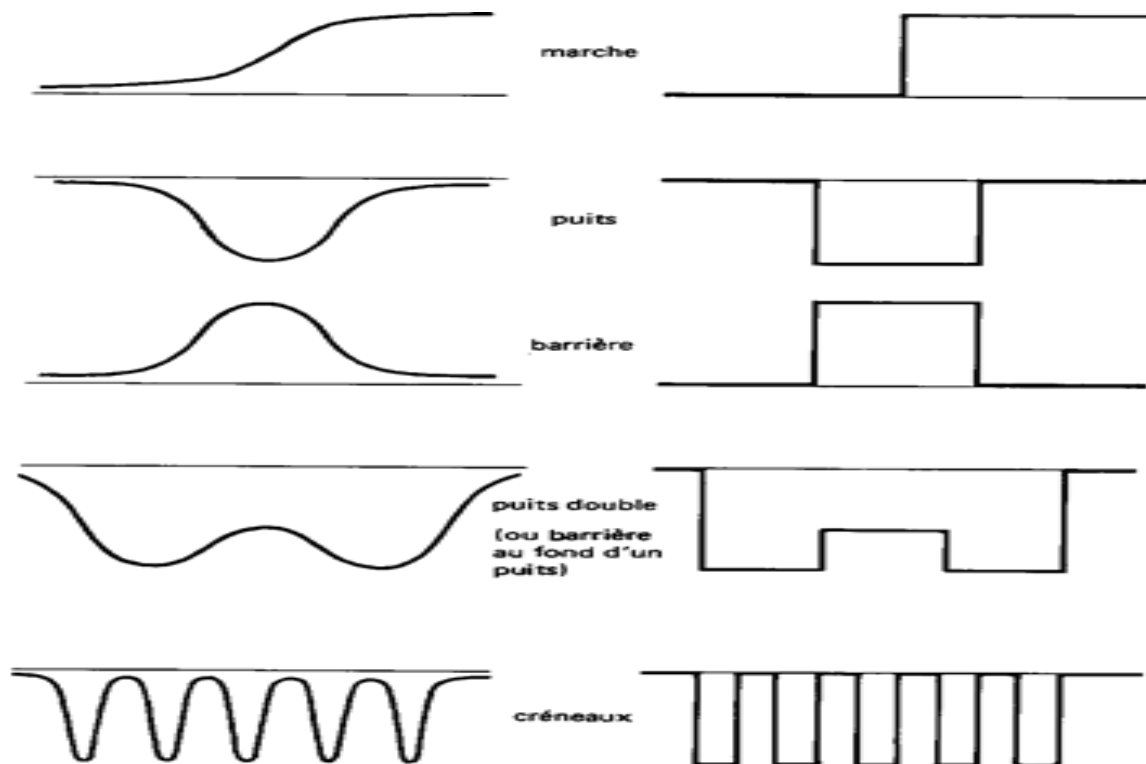
Les exemples de systèmes quantiques que nous allons étudier vont avant tout nous familiariser avec les manipulations de l'E-S.

Cependant, beaucoup ne sont pas des modèles purement gratuits, mais représentent des approches parfois excellentes de systèmes réels.

En effet dans la matière, les particules sont très souvent confrontées à des barrières de potentiel où à des puits de potentiel.

La question est de savoir quelle sera leur réaction face à ces obstacles dans le cas de la Mécanique Quantique.

L'étude des potentiels « carrés » ou « constants par morceau » est justifiée par le fait que tout potentiel réel peut-être approximé par une fonction constante par morceau.

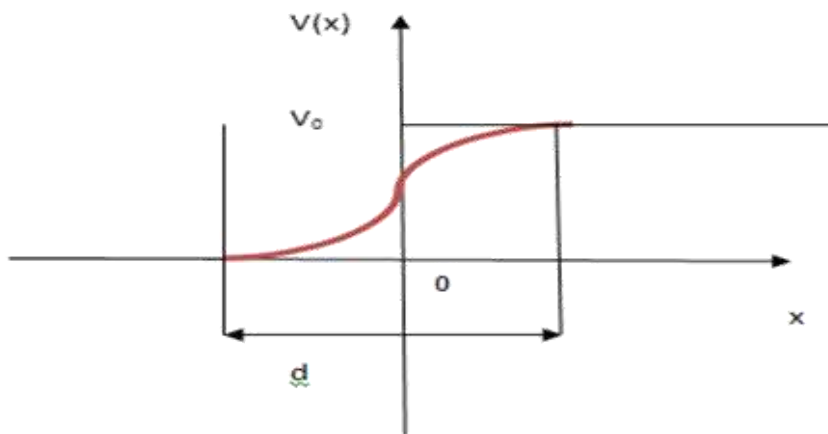


Potentiels typiques et leurs modèles en « paliers »

1-Marche de potentiel

Considérons une particule libre dans un métal ($x < 0$) et qui arrive sur la surface du métal ($x = 0$), placé dans le vide où règne un potentiel .

Du point de vue physique, la variation du potentiel $V(x)$ au voisinage de $x = 0$ ne présente pas de discontinuité (courbe rouge).



Toutefois, pour simplifier les calculs, on approche $V(x)$ par la fonction saut :

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

Cette approximation est d'autant plus valable que $d \ll \lambda$ à la longueur d'onde associée à la particule.

a -Etude classique

Deux cas peuvent se présenter :

- ❖ $E > V_0$, la particule franchira la marche de potentiel en perdant une partie de son énergie cinétique égale à l'énergie potentielle V_0 acquise.

On dit qu'il y a **transmission totale**.

- ❖ $E < V_0$, la particule ne peut pas franchir la marche de potentiel et repartira en sens inverse avec la même vitesse. On dit qu'il y a **réflexion totale**.

b-Etude quantique

Définition des coefficients de réflexion et de transmission

Par définition, le courant de probabilité est :

$|\vec{j}| = \text{densité de probabilité} \times \text{vitesse de la particule}$. Il est analogue à un flux.

➤ On définit le coefficient de réflexion par: $R = \frac{\Phi_r}{\Phi_i} = \frac{j_r}{j_i}$

➤ On définit le coefficient de transmission par: $T = \frac{\Phi_t}{\Phi_i} = \frac{j_t}{j_i}$

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

La théorie quantique apporte un résultat nouveau et surprenant par rapport à la mécanique classique, l'existence d'une onde réfléchie malgré que $E > V_0$.

En effet on montre que : $R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$ et $T = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$

Où $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ et $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$

Analyse de quelques cas limites :

- Si $E \gg V_0$:

R est presque nul, on retrouve pratiquement la transmission totale de la MC.

- Si $E \ll |V_0|$, (on est dans le cas $E > V_0$ car $E > 0$ et $V_0 < 0$):

Dans ces conditions, il y a réflexion totale, alors qu'en mécanique classique les particules se précipiteraient dans la chute du potentiel.

Cet effet typiquement quantique est observé expérimentalement en physique nucléaire : un neutron de faible énergie se trouve rejeté en arrière lorsqu'il s'approche de la surface d'un noyau où, classiquement, il rencontre brusquement un potentiel attractif très important.

2^{ème} cas : $E < V_0$

La réflexion est totale comme en MC. 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 . En effet on montre que la densité s'écrit: $|\varphi_{x>0}|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$ avec

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

Lorsque x est supérieur à la portée $\frac{1}{\alpha}$ de l'onde évanescence ($Ce^{-\alpha x}$), cette densité devient négligeable.

Donc les particules avant d'être réfléchies, pénètrent dans la région ($x > 0$), sur une distance (profondeur) de l'ordre de $\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0-E)}}$.

Pour des électrons et pour $(V_0 - E) \approx 1eV$ on trouve $\delta \approx 1 \text{ \AA}$

2- Barrière de potentiel

On considère une particule qui arrive sur une barrière de potentiel V_0 de largeur a . La description de l'énergie potentielle $V(x)$ est la suivante :

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

Le cas où l'énergie $E > V_0$ de la barrière ne sera pas traité car il n'offre rien de particulier, si non l'existence d'une onde réfléchie, donc une probabilité non nulle de revenir en arrière de la particule.

On ne considère donc que le cas $E < V_0$ qui aboutit à une conclusion spécifiquement quantique, à savoir le franchissement possible de la barrière qui, classiquement, était infranchissable pour une particule tel que $E < V_0$.

On montre que:

$$T = \frac{1}{1 + \left[\frac{\alpha^2 + k_1^2}{2\alpha k_1} \right]^2 \text{sh}^2(\alpha a)} = f(\alpha)$$

Le coefficient de transmission T , qui représente la densité relative de particules ayant franchi la barrière est donc non nulle.

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

C'est grâce à cet effet que les phénomènes de radioactivité peuvent exister.

Par exemple, une particule confinée dans le noyau derrière une barrière de potentiel nucléaire, possédant une énergie propre plus faible que la hauteur de la barrière, parvient cependant à la franchir, comme le prouve l'expérience. L'effet n'existe évidemment pas pour les particules classiques.

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

❖ cas d'une barrière très étroite (a très petit : $a \ll \frac{1}{\alpha}$)

On trouve $T = 1$, ce qui signifie que la transmission est totale, $\forall V_0 > E$.

❖ cas d'une barrière très épaisse ($a \gg \frac{1}{\alpha}$: longueur d'onde de De Broglie).

On trouve : $T \approx \left[\frac{4\alpha k_1}{\alpha^2 + k_1^2} \right]^2 e^{-2\alpha a} \approx \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\alpha a}$

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

Application :

▪ électron tel que : $E = 1 \text{ eV}$, $V_0 = 2 \text{ eV}$, $a = 1 \text{ \AA}$

On trouve $\frac{1}{\alpha} = 1.96 \text{ \AA} > a$ et $T = 78\%$ (probabilité importante de franchir la barrière).

▪ proton ($m_p = 1836 m_e$), mêmes données

On obtient $\frac{1}{\alpha} = 4.6 \cdot 10^{-2} \text{ \AA} \ll a$ et $T = 4 \cdot 10^{-19}$ (transmission négligeable).

Le cas d'un puits de potentiel sera traité en TD.

Exercice:

On se propose de déterminer l'énergie et les états stationnaires d'une particule de masse m et d'énergie E supposée négative, assujettie à se déplacer le long de l'axe ox , sous l'influence d'un "puits de potentiel delta" simple : $V(x) = -V_0\delta(x)$

où $\delta(x)$ est la distribution de Dirac centrée en $x = 0$ et V_0 est une constante positive.

On pose : $k_0 = \frac{mV_0}{\hbar^2}$ et $\rho^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}$.

- Chercher la forme des fonctions d'ondes stationnaires $\varphi(x)$ de la particule dans les deux régions de l'espace.
- Ecrire les équations aux limites que doivent vérifier les fonctions d'ondes. En déduire l'énergie E_0 que peut prendre la particule.
- Ecrire la fonction d'onde associée à E_0 , la normaliser.

Chapitre 4

Formalisme mathématique de la Mécanique Quantique

Ce formalisme est un ensemble d'outils mathématiques de base, commodes permettant de simplifier l'étude des systèmes quantiques.

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

1-Définition

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

$$\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (1)$$

$\psi(\vec{r}, t)$ doit appartenir à l'ensemble (espace) de fonctions de carré sommable, c'est-à-dire des fonctions pour lesquelles l'intégrale (1) converge. 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.

On appelle \mathcal{F} , l'ensemble (espace) des fonctions d'onde constituée par les fonctions régulières de \mathcal{L}^2 . \mathcal{F} est un sous espace de \mathcal{L}^2 .

En résumé : $\psi(\vec{r}, t) \in \mathcal{F} \Leftrightarrow \int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$ est finie

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

a- \mathcal{F} est un espace vectoriel

On montre facilement que \mathcal{F} satisfait toutes les propriétés d'un espace vectoriel et notamment :

$$\text{Si } \psi_1(\vec{r}) \text{ et } \psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F} \Rightarrow \psi(\vec{r}) = \lambda_1 \psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 \psi_2(\vec{r}) \in \mathcal{F} \quad (2)$$

b -Produit scalaire

i-Définition

Soient $\varphi(\vec{r})$ et $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, le produit scalaire de $\psi(\vec{r})$ par $\varphi(\vec{r})$ est un nombre complexe noté (φ, ψ) et défini par :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d^3r \quad (3)$$

ii-Propriétés

Elles découlent de la définition (3)

- $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$
- $(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$
- $(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi)$

Le produit scalaire est linéaire par rapport à la deuxième fonction et anti linéaire par rapport à la première.

- $(\varphi, \psi) = 0 \Rightarrow \varphi(\vec{r})$ et $\psi(\vec{r})$ sont orthogonales
- $(\psi, \psi) = \int_{espace} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$ est un nombre réel, positif, qui est nul si et seulement si $\psi(\vec{r})$ est nulle.
- $\sqrt{(\psi, \psi)}$ est appelée la norme de $\psi(\vec{r})$.

3- Bases orthonormées discrètes dans \mathcal{F}

a-Définition

Soit un ensemble dénombrable de fonction de \mathcal{F} , repérées par un indice discret i ($i = 1, 2, \dots, n, \dots$). L'ensemble $\{u_i(\vec{r})\}$ est orthonormée si :

$$(u_i, u_j) = \int u_i^*(\vec{r})u_j(\vec{r})d^3r = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (4)$$

La relation (4), dite relation d'orthonormalisation, exprime que les fonctions de l'ensemble $\{u_i(\vec{r})\}$ sont normées à l'unité et orthogonales entre elles.

$\{\mathbf{u}_i(\vec{r})\}$ constitue une base (ou un ensemble complet), si toute fonction

$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ peut se développer d'une façon unique sur les $\mathbf{u}_i(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{r}) = \sum_i c_i \mathbf{u}_i(\vec{r}) \quad (5)$$

Où les c_i sont appelées les composantes de $\psi(\vec{r})$ sur la base $\{\mathbf{u}_i(\vec{r})\}$; elles sont

$$\text{déterminées comme suit : } c_i = (\mathbf{u}_i, \psi) = \int \mathbf{u}_i^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r \quad (6)$$

La base $\{\mathbf{u}_i(\vec{r})\}$ ayant été choisie, il est équivalent de se donner $\psi(\vec{r})$ ou l'ensemble de ses composantes c_i sur les fonctions de base.

On dit que les c_i représentent $\psi(\vec{r})$ dans la base $\{\mathbf{u}_i(\vec{r})\}$.

b-Relation de fermeture

La relation de fermeture exprime le fait que l'ensemble $\{\mathbf{u}_i(\vec{r})\}$ constitue une base.

$$\text{Cette relation s'écrit : } \sum_i \mathbf{u}_i^*(\vec{r}') \mathbf{u}_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (7)$$

Réciproquement, on peut montrer que : si un ensemble orthonormé $\{\mathbf{u}_i(\vec{r})\}$ vérifie la relation de fermeture (7), il constitue une base.

4-Bases orthonormées continues

a-Définition

On appelle base orthonormée continue un ensemble de fonction $\{\mathbf{w}_\alpha(\vec{r})\}$ repérées par un indice continu α et vérifiant les relations d'orthonormalisation et de fermeture :

$$\text{R.O: } (\mathbf{w}_\alpha, \mathbf{w}_{\alpha'}) = \int \mathbf{w}_\alpha^*(\vec{r}) \mathbf{w}_{\alpha'}(\vec{r}) d^3r = \delta(\alpha - \alpha') \quad (8)$$

$$\text{R.F: } \int \mathbf{w}_\alpha^*(\vec{r}') \mathbf{w}_\alpha(\vec{r}) d\alpha = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (9)$$

Les $\mathbf{w}_\alpha(\vec{r})$ ne sont pas forcément des fonctions de \mathcal{F} , ni de \mathcal{L}^2 .

b- Composantes d'une fonction d'onde $\psi(\vec{r})$

Toute fonction $\psi(\vec{r})$ peut se développer sur les $\mathbf{w}_\alpha(\vec{r})$:

$$\psi(\vec{r}) = \int c(\alpha) \mathbf{w}_\alpha(\vec{r}) d\alpha \quad \text{où les } c(\alpha) \text{ sont appelées les composantes de } \psi(\vec{r}) \text{ sur la base } \{\mathbf{w}_\alpha(\vec{r})\} ; \text{ on montre que : } c(\alpha) = (\mathbf{w}_\alpha, \psi) = \int \mathbf{w}_\alpha^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r \quad (10)$$

Correspondance : base discrète-base continue :

$$i \leftrightarrow \alpha \qquad \sum_i \leftrightarrow \int d\alpha \qquad \delta_{ij} \leftrightarrow \delta(\alpha - \alpha')$$

5-Exemples de Bases continues

a-Ondes planes

Pour simplifier, nous étudierons des fonctions $\psi(x)$ à une dimension et de carré sommable.

Soit la fonction : $v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ décrivant une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}$ et $\notin \mathcal{F}$. $\{v_p(x)\}$ désignera l'ensemble de toutes les ondes planes correspondantes aux diverses valeurs de p , avec p variant d'une façon continue de $-\infty$ à $+\infty$.

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)v_p(x)dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p)e^{ipx/\hbar} dp$$

Avec $c(p) = (v_p(x), \psi(x)) = \bar{\psi}(p)$ qui est la TF de $\psi(x)$

Ceci traduit que $\psi(x) \in \mathcal{F}$ se développe d'une façon unique sur les $v_p(x) \notin \mathcal{F}$.

R.O: $(v_p, v_{p'}) = \delta(p - p')$

R.F: $\int v_p^*(x')v_p(x)dp = \delta(x - x')$

$\{v_p(x)\}$ vérifient **R.O** et **R.F**, donc c'est une base orthonormée continue.

La généralisation à 3 D se fait sans difficultés à partir de :

$$v_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \text{ avec } \vec{p}(p_x, p_y, p_z) \text{ et } \vec{r}(x, y, z)$$

b-Fonction Delta δ

Soit l'ensemble des fonctions de \vec{r} , $\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$, repérées par l'indice continu \vec{r}_0 , et définies par : $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$. Les $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ sont réelles.

$\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ représente l'ensemble des fonctions delta centrées aux diverses points de l'espace \vec{r}_0 . $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ n'est évidemment pas de carré sommable, donc $\notin \mathcal{F}$.

$$\psi(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) d^3 r_0$$

$$\text{avec } c(\vec{r}_0) = \psi(\vec{r}_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3 r = (\xi_{\vec{r}_0}, \psi)$$

Ceci traduit que $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ se développe d'une façon unique sur les $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}) \notin \mathcal{F}$

$$\text{RO: } (\xi_{\vec{r}_0}, \xi_{\vec{r}'_0}) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}'_0)$$

$$\text{RF: } \int \xi_{\vec{r}_0}^*(\vec{r}) \xi_{\vec{r}_0}(\vec{r}') d^3 \vec{r}_0 = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$\{\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})\}$ vérifient R.O et R.F, donc c'est une base orthonormée continue.

Remarque : L'utilité de ces bases continues apparaîtra plus clairement par la suite.

Néanmoins, il faut préciser qu'un état physique doit toujours correspondre à une fonction d'onde de carré sommable.

Donc en aucun cas $v_p(x)$ et $\xi_{\vec{r}_0}(\vec{r})$ ne peuvent représenter l'état d'une particule. Ce ne sont que des intermédiaires de calcul très commodes effectués sur $\psi(\vec{r})$, fonction qui peut représenter un état physique.

II-Espace des états – Notation de Dirac

1-Définition

Un état physique est déterminé soit par la donnée de $\psi(\vec{r})$, soit par la donnée de ses composantes sur une base.

Postulat : Tout état quantique d'une particule sera caractérisé par un vecteur d'état appartenant à un espace \mathcal{E} appelé espace des états d'une particule :

$$\psi \in \mathcal{F} \rightarrow |\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

2-Vecteurs "kets"

Dans la notation de Dirac, le vecteur d'état sera représenté par $|\psi\rangle$ et appelé "ket ψ ".

$\psi(\vec{r})$ sera interprété comme l'ensemble des composantes du "ket" $|\psi\rangle$ sur une base donnée, \vec{r} jouant le rôle d'un indice.

3-Vecteurs "Bras"

On montre que \mathcal{E} est un espace vectoriel sur \mathbb{C} et que ses éléments sont dotés d'un produit scalaire :

$\forall |\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{E}$ le produit scalaire de $|\psi\rangle$ par $|\varphi\rangle$ est défini par:

$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle$ où le vecteur $\langle\varphi|$, appelé "bra", est un élément du dual de

\mathcal{E} , noté \mathcal{E}^* . Le symbole $\langle \quad | \quad \rangle$ s'appelle "bracket".

4-Correspondance entre kets et bras

A tout "ket" correspond un "bra", la réciproque n'est pas toujours vraie.

$$|\varphi\rangle \in \mathcal{E} \rightarrow \langle\varphi| \in \mathcal{E}^*.$$

Comme le produit scalaire est anti linéaire par rapport au premier vecteur,

le "bra" associé au "ket" $\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle$ est le "bra" $\lambda_1^* \langle\varphi_1| + \lambda_2^* \langle\varphi_2|$

Remarque: $\lambda |\psi\rangle = |\lambda\psi\rangle$ et $\langle\lambda\psi| = \lambda^* \langle\psi|$

$\langle\lambda\psi|$ est le "bra" associé au "ket" $|\lambda\psi\rangle$

5-Produit scalaire dans la notation de Dirac

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r$$

Pour les propriétés voir le paragraphe I, il suffit de remplacer (,) par $\langle \quad | \quad \rangle$.

6-Extension à \mathcal{E} des différentes notions définies sur \mathcal{F}

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

Un ensemble discret $\{|\mathbf{u}_i\rangle\}$ ou continu $\{|\mathbf{w}_\alpha\rangle\}$ constitue une base si tout état appartenant à \mathcal{E} se développe d'une façon unique suivant les $|\mathbf{u}_i\rangle$ ou les $|\mathbf{w}_\alpha\rangle$.

a-Base discrète

RO: $\langle \mathbf{u}_i | \mathbf{u}_j \rangle = \delta_{ij}$ $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\mathbf{u}_i\rangle$ avec $c_i = \langle \mathbf{u}_i | \psi \rangle$

RF: $\sum_i |\mathbf{u}_i\rangle \langle \mathbf{u}_i| = \mathbf{1}$ où $\mathbf{1}$ est l'opérateur identité. Cette relation traduit le fait que $\{|\mathbf{u}_i\rangle\}$ constitue une base.

b-Base continue

RO: $\langle \mathbf{w}_\alpha | \mathbf{w}_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$ $|\psi\rangle = \int c(\alpha) |\mathbf{w}_\alpha\rangle d\alpha$ avec $c(\alpha) = \langle \mathbf{w}_\alpha | \psi \rangle$

RF: $\int |\mathbf{w}_\alpha\rangle \langle \mathbf{w}_\alpha| d\alpha = \mathbf{1}$

III-Opérateurs linéaires

1-Définition

Un opérateur linéaire A est un être mathématique qui fait correspondre, à toute fonction $(\vec{r}) \in \mathcal{F}$, d'une façon linéaire, une autre fonction $\psi'(\vec{r}) \in \mathcal{F}$:

$$\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F} \xrightarrow{A} A\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r}) \in \mathcal{F}$$

$$A(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1A\psi_1 + \lambda_2A\psi_2 = \lambda_1\psi_1' + \lambda_2\psi_2'$$

Exemples:

- Opérateur multiplication par $x : \psi \xrightarrow{X} X\psi = x\psi = \psi'$
- Opérateur dérivation par rapport à $x : \psi \xrightarrow{D_x} D_x\psi = \frac{\partial}{\partial x}\psi = \psi'$

En notation de Dirac, la définition se met sous la forme :

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E} \xrightarrow{A} A|\psi\rangle = |\psi'\rangle \in \mathcal{E}$$

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

2-Produit de deux opérateurs

Si A et B sont deux opérateurs linéaires, leur produit est défini par :

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

Le produit de deux opérateurs est un opérateur.

3-Commutateur de deux opérateurs

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

$$[A, B] = AB - BA.$$

Si $[A, B] = \mathbf{0}$, on dit que A et B commutent.

Si $[A, B] \neq \mathbf{0}$, on dit que A et B ne commutent pas.

Exemples : $[X, D_x]$ et $[D_x, D_y]$

Propriétés :

- $[A, B] = -[B, A]$
- $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$
- $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$
- $[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$

4-Inverse d'un opérateur

L'inverse A^{-1} d'un opérateur A , lorsqu'il existe est tel que :

$$AA^{-1} = A^{-1}A = \mathbf{1} \text{ où } \mathbf{1} \text{ est l'opérateur identité}$$

Propriétés:

- $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

5-Exemples d'opérateurs : Projecteurs

a-Projecteur P_ψ sur un ket $|\psi\rangle$

Soit $|\psi\rangle$ un "ket" normé à l'unité : $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

Considérons l'opérateur P_ψ défini par : $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ et appliquons le à un "ket" $|\varphi\rangle$ quelconque. On trouve que cette action donne un ket proportionnel à $|\psi\rangle$.

La signification « géométrique » de P_ψ est donc claire : c'est l'opérateur

de « projection orthogonale » sur le ket $|\psi\rangle$. Cette interprétation est confirmée par le fait que $P_\psi^2 = P_\psi$.

b-Projecteur sur un sous espace

Soient $|\varphi_1\rangle; |\varphi_2\rangle; |\varphi_3\rangle; \dots; |\varphi_q\rangle$, q vecteurs normés, \perp les uns aux autres :

$\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, \dots, q$) et soit \mathcal{E}_q le sous espace de \mathcal{E} sous-tendu par ces q vecteurs.

On définit l'opérateur P_q par $P_q = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$

On montre que $P_q^2 = P_q$ ce qui implique que P_q est un projecteur.

Il est facile de voir que P_q projette sur le sous espace \mathcal{E}_q .

P_q agissant sur un ket $|\psi\rangle$ donne la superposition linéaire des projections de $|\psi\rangle$ sur les divers $|\varphi_i\rangle$.

IV-Représentation matricielle

Choisir une représentation, c'est choisir une base orthonormée discrète ou continue dans l'espace des états. Les vecteurs et les opérateurs seront représentés par des nombres qui seront des composantes pour les vecteurs et des éléments de matrice pour les opérateurs. Le calcul vectoriel introduit auparavant devient un calcul matriciel.

1-Base discrète $\{|\mathbf{u}_i\rangle\}$

a-Représentation des "kets"

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{bmatrix} \text{ avec } c_i = \langle \mathbf{u}_i | \psi \rangle \quad \text{c'est une matrice à 1 colonne}$$

b-Représentation des "bras"

Soit $\langle \varphi |$ un "bra" quelconque :

$$\langle \varphi | = \langle \varphi | \mathbf{1} = \sum_i \langle \varphi_i | \mathbf{u}_i \rangle \langle \mathbf{u}_i | = \sum_i \langle \mathbf{u}_i | \varphi \rangle^* \langle \mathbf{u}_i | = \sum_i \mathbf{b}_i^* \langle \mathbf{u}_i | \quad \text{d'où}$$

$$\langle \varphi | \rightarrow [\mathbf{b}_1^* \quad \mathbf{b}_2^* \quad \dots \quad \mathbf{b}_i^* \quad \dots] \text{ avec } \mathbf{b}_i^* = \langle \mathbf{u}_i | \varphi \rangle^* \text{ c'est une matrice à 1 ligne}$$

On remarque que : $\langle \varphi | \psi \rangle$ est un produit scalaire (faire le produit des deux matrices).

c-Représentation des opérateurs

Un opérateur linéaire sera représenté par une matrice carré de la forme :

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & & A_{2j} & \\ \vdots & & & & \\ A_{i1} & \vdots & & A_{ij} & \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \text{ où les } A_{ij} = \langle \mathbf{u}_i | A | \mathbf{u}_j \rangle$$

Exemple: $A = |\psi\rangle\langle\varphi|$

d- Remarques

- Matrice représentant l'opérateur AB
- Matrice colonne représentant le "ket" $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$
- Expression du nombre $\langle\varphi|A|\psi\rangle$

2-Base continue

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

V-Conjugaison hermétique

1-Action d'un opérateur linéaire sur un "bra"

L'action d'un opérateur linéaire A sur un "bra" $\langle\varphi|$ donne un nouveau "bra" $\langle\varphi|A$; tel que : $\langle\varphi'| = \langle\varphi|A$.

En effet $\langle\varphi'|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$ est bien un nombre complexe (donc $\langle\varphi|A$ est bien un "bra").

Remarques :

- $A\langle\varphi|$ n'a pas de signification.
- $|\psi\rangle\lambda = \lambda|\psi\rangle$
- $\langle\psi|\lambda = \lambda\langle\psi|$ et $A\lambda|\psi\rangle = \lambda A|\psi\rangle$

2-Opérateur adjoint A^+ de A

La correspondance entre "ket" et "bra" permet d'associer à tout opérateur linéaire A , un autre opérateur linéaire A^+ appelé adjoint ou conjugué hermétique de A , selon le schéma suivant :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{A} |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$\langle\psi| \xrightarrow{A^+} \langle\psi'| = \langle\psi|A^+$$

Propriétés:

- $(\lambda_1 \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \langle \varphi_2 |) A^+ = \lambda_1 \langle \varphi_1 | A^+ + \lambda_2 \langle \varphi_2 | A^+$
- $\langle \varphi | A^+ | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^*$
- $| A \psi \rangle = A | \psi \rangle$
- $\langle A \psi | = \langle \psi | A^+$

3-Propriétés de la correspondance entre A et A^+

- $((A)^+)^+ = A$
- $(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+$
- $(A + B)^+ = A^+ + B^+$
- $(AB)^+ = B^+ A^+$

4-Conjugaison hermétique

Dans la correspondance $|\psi'\rangle = A |\psi\rangle \leftrightarrow \langle \psi'| = \langle \psi | A^+$

$|\psi'\rangle$ et $\langle \psi'|$ sont dits : conjugués hermétiques l'un de l'autre. La conjugaison hermétique associe donc A^+ à A . Elle change l'ordre des objets auxquels on l'applique ; d'où la règle :

Pour obtenir le conjugué hermétique ou l'adjoint d'une expression quelconque, comportant des constantes, des "kets", des "bras", des opérateurs, il faut:

- ❖ Remplacer : Ct par Ct *; le "ket" par le "bra"; le "bra" par le "ket" et l'opérateur par son adjoint
- ❖ Inverser l'ordre des facteurs (la place de la Ct n'a pas d'importance).

Exemples:

- $\lambda \langle u | A | v \rangle | w \rangle \langle \psi |$
- $\lambda | u \rangle \langle v | w \rangle$

5-Opérateurs hermétiques

Un opérateur A est dit hermétique si : $A = A^\dagger$

Propriétés :

- $\langle \varphi | A^\dagger | \psi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A | \varphi \rangle^*$
- $\langle \varphi | A \psi \rangle = \langle A \varphi | \psi \rangle$
- $P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$ est hermétique
- Le produit de deux opérateurs hermétiques A et B n'est hermétique que si $[A, B] = 0$.

6-Représentation matricielle de A^\dagger

Dans la base $\{|u_i\rangle\}$, les éléments de matrice associée à A^\dagger s'écrivent :

$$A^\dagger_{ij} = \langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^* = A^*_{ji}$$

Dans une représentation donnée, les matrices représentants A et A^\dagger sont hermétiques conjuguées l'une de l'autre. On passe de l'une à l'autre par une conjugaison complexe suivie d'une transposition.

Exemple:

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

Si A est hermétique : $A = A^\dagger$ ce qui donne : $A^\dagger_{ij} = A_{ij} = A^*_{ji}$

Un opérateur hermétique est représenté par une matrice hermétique, c'est-à-dire telle que deux éléments quelconques symétriques par rapport à la diagonale principale sont complexes conjugués l'un de l'autre.

Pour $i = j$, on a $A_{ii} = A^*_{ii}$, ce qui veut dire que les éléments diagonaux d'une matrice hermétique sont des nombres réels.

VI-Complément sur les opérateurs

1-Opérateurs unitaires

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

2-Trace d'un opérateur

La trace d'un opérateur A , notée TrA , est la somme de ses éléments de matrice diagonaux : $TrA = \sum_i \langle u_i | A | u_i \rangle$

Propriétés :

- La trace est un invariant (indépendant de la base)
- $TrAB = TrBA$
- $TrABC = TrBCA = TrCAB$

VII-Equations aux valeurs propres- Observables

1-Valeurs et vecteurs propres d'un opérateur

a-Définitions

L'équation aux valeurs propres s'écrit : $A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$ où $\lambda \in \mathbb{C}$.

On dit que $|\psi\rangle$ est vecteur propre de A (\vec{v}, \mathbf{p}) associé à la (\mathbf{v}, \mathbf{p}) λ .

Cette équation n'a en général de solutions que lorsque λ prend certaines valeurs, dites valeurs propres de A (\mathbf{v}, \mathbf{p}). L'ensemble des (\mathbf{v}, \mathbf{p}) s'appelle le spectre de A .

- ❖ $|\psi\rangle$ et $\alpha|\psi\rangle$ sont (\vec{v}, \mathbf{p}) de A avec la même (\mathbf{v}, \mathbf{p}) λ .
- ❖ λ est dite non dégénérée (ou dégénérée d'ordre $g = 1$) si elle lui correspond un seul (\vec{v}, \mathbf{p}). (à une Ct multiplicatif près).
- ❖ λ est dite dégénérée d'ordre ($g > 1$) si elle lui correspond plusieurs (\vec{v}, \mathbf{p}) $|\psi^i\rangle$ ($i = 1, 2, 3, \dots, g$). Les $|\psi^i\rangle$ sont linéairement indépendants.
- ❖ L'ensemble des $|\psi^i\rangle$ associés à λ constitue un espace vectoriel de dimension g appelé sous espace propre de λ . En effet, tout $|\psi\rangle$ de la forme : $|\psi\rangle = \sum_{i=1}^g c_i |\psi^i\rangle$ est (\vec{v}, \mathbf{p}) de A avec la même (\mathbf{v}, \mathbf{p}) λ .

b-Recherche des (\mathbf{v}, \mathbf{p}). et des (\vec{v}, \mathbf{p}). d'un opérateur

Considérons un espace de dimension finie N , et nous admettons que les résultats peuvent-être généralisés à un espace de dimension infinie.

Choisissons une représentation, par exemple $\{|\mathbf{u}_i\rangle\}$.

Projetons l'équation $A |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$ sur les différents vecteurs de base $|\mathbf{u}_i\rangle$, puis insérons la RF ($\sum_j |\mathbf{u}_j\rangle \langle \mathbf{u}_j| = \mathbf{1}$); on obtient :

$$\sum_j [A_{ij} - \lambda \delta_{ij}] c_j = 0$$

Cette équation est un système de N équations ($i = 1, 2, \dots, N$) à N inconnues c_j ($j = 1, 2, \dots, N$).

C'est un système linéaire et homogène qui n'admet de solution que si :

$$\text{Det}(A - \lambda I) = 0 \quad \text{où } I \text{ est la matrice unité.}$$

Cette équation, dite équation caractéristique permet de déterminer toutes les (v, p) de A . C'est une équation de degré N en λ qui possède N racines réelles ou imaginaires, distinctes ou confondues.

2-Observables

a- Propriétés des (v, p) et des (\vec{v}, p) d'un opérateur ($A = A^+$)

- ❖ Les (v, p) sont réels.
- ❖ Deux (\vec{v}, p) correspondant à deux $(v, p) \neq$ sont orthogonales .

b-Définition d'une observable

Soit un opérateur hermétique A dont les $(v, p) \{a_n\}$ forment un spectre discret ($n = 1, 2, \dots$) pour simplifier.

$$A |\psi_n^i\rangle = a_n |\psi_n^i\rangle \quad i = 1, 2, \dots, g_n, \quad \text{où } g_n \text{ est l'ordre de dégénérescence de } a_n.$$

- Les $|\psi_n^i\rangle$ seront des vecteurs linéairement indépendants choisis orthonormés à l'intérieur de chaque sous espace $E_n : \langle \psi_n^i | \psi_n^j \rangle = \delta_{ij}$.
- De plus, on vient de voir que tout vecteur appartenant à E_n est orthogonal à tout vecteur d'un autre sous espace $E_{n'} : \langle \psi_n^i | \psi_{n'}^j \rangle = 0$ avec $n \neq n'$ et $\forall i, j$.
- Un tel choix aboutit à un système orthonormé de (\vec{v}, p) de A . En regroupant ces deux relations, on obtient : $\langle \psi_n^i | \psi_{n'}^{i'} \rangle = \delta_{ii'} \delta_{nn'}$

Par définition, l'opérateur hermétique A est une observable si ce système orthonormé de vecteurs forme une base dans \mathcal{E} . Ceci peut s'exprimer par la relation de fermeture : $\sum_n \sum_i^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| = \mathbf{1}$

3-Ensembles complets d'observables qui commutent (E.C.O.C)

a-Théorèmes importants

Théorème I : Si deux opérateurs A et B commutent, et si $|\psi\rangle$ est un (\vec{v}, p) de A , $B|\psi\rangle$ est aussi (\vec{v}, p) de A , avec la même (v, p) .

Théorème II : Si deux observables A et B commutent, et si $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont deux (\vec{v}, p) de A de $(v, p) \neq$, l'élément de matrice $\langle \psi_1 | B | \psi_2 \rangle = 0$.

Théorème III : Si deux observables A et B commutent, on peut construire une base orthonormée de l'espace des états \mathcal{E} , constituée par des (\vec{v}, p) communs à A et B .

Désignons par $|u_{n,p}^i\rangle$ les (\vec{v}, p) communs à A et B (les indices n et p permettent de repérer les (v, p) a_n et b_p de A et B . L'indice supplémentaire i sert éventuellement à distinguer les différents (\vec{v}, p) de base qui correspondent aux mêmes (v, p) a_n et b_p .

$$A |u_{n,p}^i\rangle = a_n |u_{n,p}^i\rangle \quad \text{et} \quad B |u_{n,p}^i\rangle = b_p |u_{n,p}^i\rangle$$

Démontrons la réciproque de ce théorème :

$$AB |u_{n,p}^i\rangle = b_p A |u_{n,p}^i\rangle = b_p a_n |u_{n,p}^i\rangle$$

$$BA |u_{n,p}^i\rangle = a_n B |u_{n,p}^i\rangle = a_n b_p |u_{n,p}^i\rangle$$

En retranchant On obtient $(AB - BA) = 0 \Rightarrow [A, B] = 0$.

b-Ensembles complets d'observables qui commutent (ECOC).

Considérons une observable A et une base de \mathcal{E} constituée de (\vec{v}, p) de A .

- Si aucune des (v, p) a_n de A n'est dégénérée ($g_n = 1 \forall n$) : tous les sous-espaces propres \mathcal{E}_n ont des dimensions 1 (l'indice i dans ce cas est inutile). La donnée de a_n détermine de manière unique le (\vec{v}, p) correspondant (à un facteur multiplicatif près). En d'autres termes, il existe une seule base de \mathcal{E} formée avec des (\vec{v}, p) de A .

On dit alors que l'observable A constitue à elle seule un **E.C.O.C.**

- Si au contraire une ou plusieurs (v, p) de A sont dégénérées ($g_n > 1$). La donnée de a_n ne suffit plus à déterminer de façon unique un (\vec{v}, p) , car à la (v, p) a_n correspond plusieurs (\vec{v}, p) indépendants. Dans ce cas la base de \mathcal{E} n'est plus unique. L'observable A ne constitue pas dans ce cas un **E.C.O.C.**

Considérons maintenant une autre observable B qui commute avec A et construisons une base orthonormée de (\vec{v}, p) communs à A et B .

Par définition, A et B forment un **E.C.O.C** si cette base est unique, c'est-à-dire si, à chacun des couples possibles de (v, p) $\{a_n, b_p\}$ il correspond un seul (\vec{v}, p) de la base.

VIII-Exemples de représentations et d'observables

1-Les représentations $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|\vec{p}\rangle\}$

a-Définition

Aux paragraphes I-5-a et I-5-b, nous avons introduits deux bases particulières de \mathcal{F} : $\{\xi_{\vec{r}}(\vec{r}_0)\}$ et $\{v_{\vec{p}}(\vec{r}_0)\}$:

$$\xi_{\vec{r}}(\vec{r}_0) = \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}) \quad \text{et} \quad v_{\vec{p}}(\vec{r}_0) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}_0/\hbar}$$

A chacune de ces fonctions de bases, nous allons faire correspondre un "ket" tel que :

$$\xi_{\vec{r}}(\vec{r}_0) \rightarrow |\vec{r}\rangle \quad v_{\vec{p}}(\vec{r}_0) \rightarrow |\vec{p}\rangle$$

A partir de ces deux bases, nous allons définir deux représentations :

$$\{|\vec{r}\rangle\} = \{|\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}\rangle\} \quad \text{et} \quad \{|\vec{p}\rangle\} = \{|\mathbf{p}_x, \mathbf{p}_y, \mathbf{p}_z\rangle\}$$

A une dimension on aura $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ **et** $\{|\mathbf{p}_x\rangle\}$

b-RO et RF

$$\text{RO:} \quad \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \int \xi_{\vec{r}}^*(\vec{r}_0) \xi_{\vec{r}'}(\vec{r}_0) d^3 r_0 = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \int v_{\vec{p}}^*(\vec{r}_0) v_{\vec{p}'}(\vec{r}_0) d^3 r_0 = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\text{RF:} \quad \int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| d^3 r = 1 \qquad \int |\vec{p}\rangle \langle \vec{p}| d^3 p = 1$$

c-Composantes d'un "ket"

Considérons un ket $|\psi\rangle$ quelconque, correspondant à la fonction d'onde $\psi(\vec{r})$. Les relations de fermeture précédentes permettent de l'écrire sous l'une des deux formes suivantes :

$$|\psi\rangle = \int |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle d^3 r \quad \text{ou} \quad |\psi\rangle = \int |\vec{p}\rangle \langle \vec{p} | \psi \rangle d^3 p$$

$$\text{On montre que :} \quad \langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) \quad \text{et} \quad \langle \vec{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\vec{p})$$

La valeur de la fonction d'onde au point \vec{r} apparaît donc comme la composante du "ket" $|\psi\rangle$ sur le vecteur de base $|\vec{r}\rangle$ de la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$.

La fonction d'onde dans l'espace des impulsions $\bar{\psi}(\vec{p})$ s'interprète de façon analogue.

Exemples:

- Si $|\psi\rangle = |\vec{p}\rangle$ $\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = v_{\vec{p}}(\vec{r})$
- Si $|\psi\rangle = |\vec{r}'\rangle$ $\langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \xi_{\vec{r}}(\vec{r}')$

d-Passage de la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ à $\{|\vec{p}\rangle\}$

Ce passage fait intervenir les nombres :

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = (\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle)^* = v_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

Un "ket" donné $|\psi\rangle$ est représenté par $\langle\vec{r}|\psi\rangle = \psi(\vec{r})$ dans la représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ et par $\langle\vec{p}|\psi\rangle = \bar{\psi}(\vec{p})$ dans $\{|\vec{p}\rangle\}$.

Les formules de changement de représentation nous montre que $\psi(\vec{r})$ et $\bar{\psi}(\vec{p})$ sont reliées par la transformation de Fourier.

2-Les opérateurs \vec{R} et \vec{P}

a-Définition

Soit $|\psi\rangle$ un "ket" quelconque de \mathcal{E} ; on définit l'opérateur vectoriel \vec{R}

par ses composantes X, Y, Z dont l'action en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$ est donnée par :

$$\langle\vec{r}|X|\psi\rangle = x\langle\vec{r}|\psi\rangle \quad \langle\vec{r}|Y|\psi\rangle = y\langle\vec{r}|\psi\rangle \quad \langle\vec{r}|Z|\psi\rangle = z\langle\vec{r}|\psi\rangle$$

X (Y et Z) coïncide avec l'opérateur multiplication par x (y et z) où x, y, z sont les 3 indices repérant $|\vec{r}\rangle$ ou plus simplement les composantes de \vec{r} .

Exemple:

- $\langle\varphi|X|\psi\rangle$

On définit de même l'opérateur vectoriel \vec{P} par ses composantes P_x, P_y, P_z dont l'action, en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$, est donnée par :

$$\langle\vec{p}|P_x|\psi\rangle = p_x\langle\vec{p}|\psi\rangle \quad \langle\vec{p}|P_y|\psi\rangle = p_y\langle\vec{p}|\psi\rangle \quad \langle\vec{p}|P_z|\psi\rangle = p_z\langle\vec{p}|\psi\rangle$$

Où p_x, p_y, p_z sont les 3 indices repérant $|\vec{p}\rangle$ ou plus simplement les composantes de \vec{p} .

Cherchons comment l'opérateur \vec{P} agit en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$.

Pour cela, il suffit de calculer $\langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle$.

$$\text{On trouve : } \langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle\vec{r}|\psi\rangle$$

$$\text{D'où la relation générale : } \langle\vec{r}|\vec{P}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \langle\vec{r}|\psi\rangle$$

En représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$, l'opérateur \vec{P} coïncide avec l'opérateur différentiel $\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$.

Exemple de calcul en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$:

- $\langle \varphi | P_x | \psi \rangle$
- $\langle \vec{r} | [X, P_x] | \psi \rangle$

Exercice : Chercher comment agit X en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$.

\vec{R} et \vec{P} sont hermétiques.

Montrons que X est hermétique:

$$\langle \varphi | X^+ | \psi \rangle = \langle \psi | X | \varphi \rangle^* = \langle \varphi | X | \psi \rangle \Rightarrow X \text{ est hermétique.}$$

Des démonstrations semblables montrent que Y et Z sont aussi hermétiques.

Pour P_x, P_y, P_z , en utilisant la représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$, les calculs sont analogues à ceux d'en haut.

c-Vecteurs propres de \vec{R} et \vec{P}

Considérons l'action de l'opérateur X sur le "ket" $|\vec{r}_0\rangle$, en représentation $\{|\vec{r}\rangle\}$:

$$\langle \vec{r} | X | \vec{r}_0 \rangle = x \langle \vec{r} | \vec{r}_0 \rangle = x \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = x_0 \delta(\vec{r}_0 - \vec{r}) = x_0 \langle \vec{r} | \vec{r}_0 \rangle$$

D'où $X |\vec{r}_0\rangle = x_0 |\vec{r}_0\rangle$.

Un raisonnement analogue, montre que les "kets" $|\vec{r}_0\rangle$ sont aussi vecteurs propres de Y et Z . En supprimant l'indice zéro, on obtient :

$$X |\vec{r}\rangle = x |\vec{r}\rangle \quad Y |\vec{r}\rangle = y |\vec{r}\rangle \quad Z |\vec{r}\rangle = z |\vec{r}\rangle$$

De la même façon, mais en représentation $\{|\vec{p}\rangle\}$, on montre que :

$$P_x |\vec{p}\rangle = p_x |\vec{p}\rangle \quad P_y |\vec{p}\rangle = p_y |\vec{p}\rangle \quad P_z |\vec{p}\rangle = p_z |\vec{p}\rangle$$

\vec{R} et \vec{P} sont des observables

Les relations de fermeture montrent que $\{|\vec{r}\rangle\}$ et $\{|\vec{p}\rangle\}$, constituent une base dans \mathcal{E} et comme \vec{R} et \vec{P} sont hermétiques, ils sont des observables.

Chapitre 5

Les postulats de la mécanique quantique

Après avoir établi le formalisme mathématique de la MQ, on est maintenant en mesure d'énoncer les postulats généraux, valable pour tout système physique.

I-Enoncé des postulats

1-Description de l'état physique

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

➤ **1^{er} Postulat :**

A un instant t_0 fixé, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un "ket" $|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{E}$.

Ce premier postulat implique un principe de superposition : une combinaison linéaire de vecteurs d'état est un vecteur d'état:

Si $|\psi_i\rangle \in \mathcal{E}$, alors $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \in \mathcal{E}$

2-Description des grandeurs physiques

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

➤ **2^{ème} Postulat :**

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

3-Mesure des grandeurs physiques

a-Résultats possibles

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

➤ **3^{ème} Postulat :**

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

Remarques :

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

b-Principe de décomposition spectrale

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

➤ **4^{ème} Postulat :** (cas d'un spectre discret)

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

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

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

Remarque :

- Si $g_n = 1$ (le spectre discret est non dégénéré) ; alors :

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

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

- Si le spectre est continu et non dégénéré :

La probabilité élémentaire $dP(\alpha)$ d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ vaut :

$dP(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha$ où $|v_\alpha\rangle$ est le vecteur propre correspondant à la valeur propre α de l'observable A associée à la grandeur physique \mathcal{A} .

- Autre écriture de $P(a_n)$:

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

où P_n est le projecteur sur le sous espace \mathcal{E}_n :

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$$

c-Réduction du paquet d'onde

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

- **5ème Postulat :**

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

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

Remarque :

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

4-Evolution des systèmes dans le temps

- **6ème Postulat :**

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

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

où $\mathbf{H}(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système .

$\mathbf{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t)$ est l'opérateur Hamiltonien du système.

5-Règles de quantification

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

Application:

- Oscillateur harmonique à une dimension

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

- Particule dans un potentiel scalaire

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

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

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

Mais en Mécanique quantique: $\vec{R} \cdot \vec{P} \neq \vec{P} \cdot \vec{R}$

de plus, ni $\vec{R} \cdot \vec{P}$, ni $\vec{P} \cdot \vec{R}$ ne sont hermétiques.

Pour cela, on ajoute une règle de symétrisation, qui permet de définir de façon unique le produit $\vec{r} \cdot \vec{p}$.

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

Règle :

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

II-Interprétation et contenu physique des postulats

1-Interprétation probabiliste de ψ

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

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

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

- La probabilité pour qu'une mesure de sa position donne un résultat compris entre \vec{r} et $\vec{r} + \overrightarrow{d\mathbf{r}}$ vaut :

$$dP(\vec{r}) = |\langle \vec{r} | \psi \rangle|^2 d^3r = |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$$

- La probabilité pour qu'une mesure de son impulsion donne un résultat compris entre \vec{p} et $\vec{p} + \overrightarrow{d\mathbf{p}}$ vaut :

$$dP(\vec{p}) = |\langle \vec{p} | \psi \rangle|^2 d^3p = |\bar{\psi}(\vec{p})|^2 d^3p$$

2-Quantification de certaines grandeurs physiques

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

3-Valeur moyenne d'une observable

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

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

Exemples :

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

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

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

4-Ecart quadratique moyen

La valeur moyenne $\langle A \rangle$ donne l'ordre de grandeur de la valeur de A lorsque le système se trouve dans l'état $|\psi\rangle$, mais ne donne aucune information sur la dispersion des résultats.

Pour avoir cette information, on pourrait par exemple prendre pour chaque mesure de A , la différence entre la valeur obtenue et $\langle A \rangle$; on calculera ensuite la moyenne de ces écarts ; mais cela conduit à un résultat nul, en effet $\langle A - \langle A \rangle \rangle = 0$.

Pour pallier cette difficulté on définit un écart ΔA de telle façon que $(\Delta A)^2$ soit la moyenne des carrés des écarts c'est-à-dire:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

$$\text{Ce qui donne: } \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

5-Conservation de la norme

On considère un système dans l'état $|\psi\rangle$.

$$\text{On montre que } \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0$$

Ceci signifie que si $|\psi\rangle$ est normé à $t = 0$, il le sera au cours du temps.

6-Evolution de la valeur moyenne d'une observable

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

On montre que :
$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

où $H(t)$ est l'hamiltonien du système.

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

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

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

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

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

7-Constantes du mouvement

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

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

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

Pour un système conservatif (H ne dépend pas explicitement du temps),

H lui même est une constante du mouvement.

Chapitre 6

L'oscillateur harmonique linéaire à une dimension

I-L'oscillateur harmonique en Mécanique classique

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

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

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

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

$$\text{La solution la plus générale s'écrit : } \mathbf{x} = \mathbf{x}_M \cos(\omega t - \varphi) \quad (1)$$

Elle dépend de 2 constantes, \mathbf{x}_M et φ qui sont déterminées par les conditions initiales du Mv. La particule est donc animée d'un Mv oscillatoire sinusoïdale autour du pt $\mathbf{0}$, d'amplitude \mathbf{x}_M et de pulsation ω

L'énergie potentielle en chaque point s'obtient par : $\vec{\mathbf{F}} = -\overrightarrow{\text{grad}}(V)$.

$$\text{Soit} \quad V(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{x}^2$$

L'énergie totale est :

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

En reportant dans (2), la solution (1), on trouve: $\mathbf{E} = \frac{1}{2} m \omega^2 \mathbf{x}_M^2$

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

II-L 'oscillateur harmonique en mécanique quantique

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

On obtient aisément à partir de l'équation (2), l'opérateur hamiltonien du système en remplaçant les grandeurs x et p par les observables X et P_x :

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \quad (3)$$

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

H étant indépendant du temps (système conservatif), l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$H|\varphi_{\nu}^i\rangle = E_{\nu}|\varphi_{\nu}^i\rangle \quad (4)$$

Où $|\varphi_{\nu}^i\rangle$ et E_{ν} sont respectivement les valeurs propres et les $\vec{\nu}$.propres de H

L'indice ν peut à priori être discret ou continu.

L'indice i permet de distinguer les # $\vec{\nu}$. p orthogonaux associés à la même valeur p. E_{ν} .

L'équation (4) s'écrit en représentation $\{|x\rangle\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \varphi_{\nu}^i(x) = E_{\nu}(x) \varphi_{\nu}^i(x) \quad (5)$$

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

- la méthode d'intégration (résolution de (5)).
- la méthode des opérateurs (résolution de (4)).

Nous allons utiliser cette dernière.

1-Valeurs propres de H

Nous allons entreprendre l'étude de l'équation $H |\varphi^i_{\nu}\rangle = E_{\nu} |\varphi^i_{\nu}\rangle$

et trouver le spectre de $H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$

Pour cela on introduit :

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

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \quad \text{et} \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P_x \quad \text{On vérifie que} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i$$

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

❖ Les opérateurs :

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

Ces deux formules s'inversent facilement pour donner :

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

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

❖ Introduisons pour terminer $N = a^+ a$:

N est hermétique.

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2} ; \text{ de sorte que les } (\vec{v}, \mathbf{p}) \text{ de } \hat{H} \text{ sont } (\vec{v}, \mathbf{p}) \text{ de } N \text{ et vice versa.}$$

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

$$\text{Posons } N |\varphi^i_{\nu}\rangle = \nu |\varphi^i_{\nu}\rangle$$

Lorsque cette équation sera résolue, nous saurons que le (\vec{v}, \mathbf{p}) de N est aussi

$$(\vec{v}, \mathbf{p}) \text{ de } H \text{ avec la valeur propre } E_{\nu} = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega.$$

a-Détermination du spectre de H

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

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

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

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

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

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

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

b-interprétation des opérateurs a et a^+

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

$$\Leftrightarrow H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

On vérifie aisément que :

- $a|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de H associée à la valeur propre $E_n - \hbar\omega = E_{n-1}$, ce qui implique que $a|\varphi_n\rangle \sim |\varphi_{n-1}\rangle$, car les valeurs propres sont simples.
- $a^+|\varphi_n\rangle$ est vecteur propre de H associée à la valeur propre $E_n + \hbar\omega = E_{n+1}$, ce qui implique que $a^+|\varphi_n\rangle \sim |\varphi_{n+1}\rangle$, car les valeurs propres sont simples.

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 $\hbar\omega$.

2-Etats propres de H

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

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

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

$$|\varphi_1\rangle = c_1\mathbf{a}^+|\varphi_0\rangle$$

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

(on prend $c_1 = \mathbf{1}$). D'où

$$|\varphi_1\rangle = \mathbf{a}^+|\varphi_0\rangle$$

On peut de même construire $|\varphi_2\rangle$ à partir de $|\varphi_1\rangle$:

$$|\varphi_2\rangle = c_2\mathbf{a}^+|\varphi_1\rangle$$

En imposant à $|\varphi_2\rangle$ d'être normé, on trouve :

$$|\varphi_2\rangle = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{2}}\mathbf{a}^+|\varphi_1\rangle = \frac{\mathbf{1}}{\sqrt{2}}(\mathbf{a}^+)^2|\varphi_0\rangle$$

Le procédé se généralise facilement. On trouve :

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

L'action des opérateurs \mathbf{a} et \mathbf{a}^+ sur les vecteurs de la base

$\{|\varphi_n\rangle\}$ (vecteurs propres de \mathbf{H} et \mathbf{N}) est :

$$\mathbf{a}^+|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+\mathbf{1}}|\varphi_{n+1}\rangle \quad \text{et} \quad \mathbf{a}|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$$

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

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

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

3-Fonctions d'onde associées aux états stationnaires

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

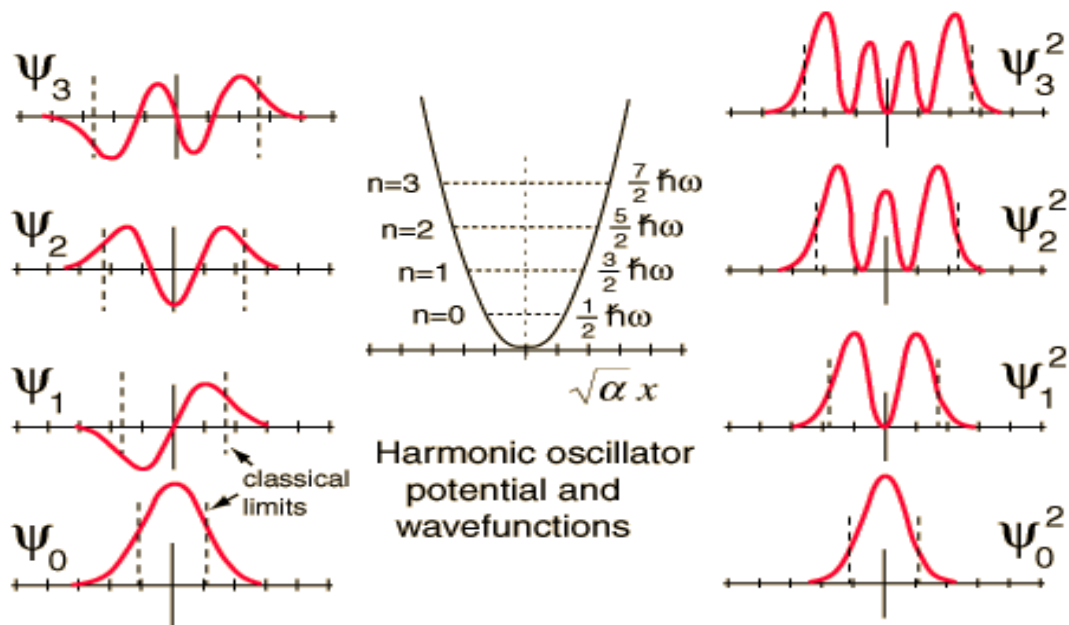
Déterminons tout d'abord la fonction $\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle$ qui représente l'état $|\varphi_0\rangle$. Il suffit de projeter l'état $a|\varphi_0\rangle=0$ sur $|x\rangle$.

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

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

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

La figure ci-dessous donne l'allure des quatre premières fonctions d'onde et de leurs densités de probabilité.



Avec $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$

III-Comparaison entre l'oscillateur classique et quantique

- En Mécanique classique, l'énergie la plus basse de l'oscillateur harmonique est obtenue lorsque la particule est immobile ($\mathbf{p} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{T} = \mathbf{0}$) à l'origine des abscisses ($\mathbf{x} = \mathbf{0}$ et $\mathbf{V} = \mathbf{0}$), donc $E = 0$. Il en va autrement en Mécanique quantique : l'état d'énergie minimale est $|\varphi_0\rangle$ dont l'énergie est $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$ n'est pas nulle. Cette différence essentielle entre les résultats quantique et classique peut-être considérée comme ayant son origine dans les relations d'incertitudes, qui interdisent de minimiser simultanément énergie cinétique et énergie potentielle ($\Delta x \Delta p \geq \hbar$ ou $\geq \frac{\hbar}{2}$).
- On remarque que la fonction d'onde et donc la densité de probabilité correspondant au niveau fondamental ($n = 0$) est une Gaussienne. C'est-à-dire qu'il est "possible" en quantique, d'observer la particule en tout point de l'axe ox , puisque la fonction d'onde ne s'annule qu'à l'infini, alors qu'en cas classique la particule ne peut se déplacer que sur un segment de droite $[-x_m, +x_m]$.
- On peut vérifier que pour les états d'énergies de plus en plus élevés c'est-à-dire pour des valeurs de n de plus en plus grandes, l'allure de la courbe de densité de probabilité quantique se rapproche de plus en plus de la courbe de probabilité classique (le temps de présence de la particule en chaque point) pour une même énergie. On retrouve alors le modèle de physique classique dans le modèle quantique pour les hautes énergies.

Eléments de bibliographie

❖ **Mécanique quantique - Thermodynamique.**

Travaux dirigés : N. Hulin-Jung ; J. Klein Hermann

❖ **Physique Quantique et Thermodynamique**

Cours de Physique : Pierre Morel Hermann

❖ **Problèmes corrigés de Physique avec rappels de cours MP2-PC2**

A. Es-sbai ; A. Guessous ; N. Najid ; M. Ouazzani

❖ **Physique MP2-PC2 Caractère quantique de la matière**

C. Janot et M. Gerl Hachette Université

❖ **Mécanique quantique Tome I**

Claude Cohen-Tannoudji ; Bernard Diu Hermann

❖ **Mécanique quantique**

Jean-Luis Basdevant Ecole polytechnique Ellipses