

COURS DE

MECANIQUE QUANTIQUE ET RELATIVITE RESTREINTE

Filière MIP-S4 (Section 1)

REALISE PAR :

Le Professeur Abderrahman EL BOUKILI

Année universitaire 2019/2020

Sommaire

| | |
|---|----|
| Chapitre I : Fondement Physique de la Mécanique Quantique | 4 |
| 1 Introduction historique | 4 |
| 2 Théorie du Rayonnement Thermique et Théorie de Quantification..... | 5 |
| 3 Aspect Corpusculaire de la Lumière | 6 |
| 3.1 Définition du photon | 6 |
| 3.2 Effet photoélectrique | 6 |
| 3.3 Effet Compton, | 9 |
| 4 Généralisation du Double Aspect Ondulatoire Et Corpusculaire | 11 |
| 4.1 Aspect ondulatoire de la matière: Onde de matière | 11 |
| 4.2 Onde de Matière et Equation de Schrödinger | 12 |
| 4.3 4.4 Vitesse de groupe, Vitesse de phase | 13 |
| Chapitre II: Bases mathématiques de la théorie quantique..... | 14 |
| 1 Vecteurs et opérateurs dans l'espace de Hilbert | 14 |
| 2 Espace des Fonctions D'onde F | 14 |
| 2.1 Définition:..... | 14 |
| 2.2 Le produit scalaire: | 14 |
| 2.3 Opérateurs linéaires sur F | 15 |
| 2.4 Base discrète de l'espace vectoriel F | 15 |
| 2.5 Base continues Orthonormée ($\notin F$) | 16 |
| 3 Représentation de Dirac, Espace des Etats | 17 |
| 4 Représentations dans L'espace des Etats..... | 19 |
| 4.1 Caractérisation en notation de Dirac d'une base orthonormée : | 20 |
| 4.2 Représentations des vecteurs ket et bras | 20 |
| 4.3 Représentation des opérateurs..... | 21 |
| 4.4 Changement de représentation : | 22 |
| 5 Spectre d'un Opérateur. Equation aux Valeurs Propres | 22 |
| 5.1 Définition : | 22 |
| 5.2 Equation aux valeurs propres de A , équation caractéristiques | 23 |
| 5.3 Notion d'observables | 23 |
| 6 Applications | 26 |
| 6.1 Représentations $\{ r\rangle\}$ et $\{ p\rangle\}$ | 26 |

| | | |
|--|--|----|
| 6.2 | Opérateurs R et P | 26 |
| Chapitre III: Postulats de la Mécanique Quantique | | 29 |
| 1 | Postulats de la mécanique quantique | 29 |
| 2 | Evolution du système dans le temps..... | 32 |
| Chapitre IV : Etude de Quelques Systèmes Quantiques Simples..... | | 35 |
| 1 | L'équation générale de Schrödinger | 35 |
| 2 | Potentiel carre unidimensionnel | 36 |
| 2.1 | Analogie avec l'optique | 36 |
| 2.2 | Réflexion et transmission par une barrière de potentiel | 36 |
| 2.3 | Particule dans la boîte unidimensionnelle | 41 |
| 3 | Potentiel parabolique: problème de l'oscillateur harmonique unidimensionnel..... | 41 |
| 3.1 | Traitement classique | 42 |
| 3.2 | Traitement quantique | 42 |
| Chapitre V : Notions de relativité restreinte..... | | 44 |
| 1 | Insuffisances de la mecanique de galilee - newton..... | 44 |
| 1.1 | Transformation de Galilée..... | 44 |
| 1.2 | Insuffisances de la transformation de Galilée et principe de relativité restreinte | 44 |
| 1.3 | Postulats de la relativité restreinte (Einstein, 1905)..... | 44 |
| 1.4 | Conséquences sur les notions de temps et de distance | 45 |
| 2 | Transformation speciale de lorentz..... | 45 |
| 2.1 | Transformation de Lorentz..... | 45 |
| 2.2 | Transformation des vitesses..... | 46 |
| 2.3 | Invariance de l'intervalle et notion de quadrivecteur..... | 46 |
| 2.4 | Dilatation des temps | 47 |
| 2.5 | Temps propre | 47 |
| 2.6 | Contraction des longueurs | 48 |
| 3 | Elements de dynamique relativiste..... | 48 |
| 3.1 | Introduction :..... | 48 |
| 3.2 | Equivalence masse-énergie | 50 |
| 4 | Unites et ordres de grandeur de l'énergie et masse..... | 51 |

Chapitre I : Fondement Physique de la Mécanique Quantique

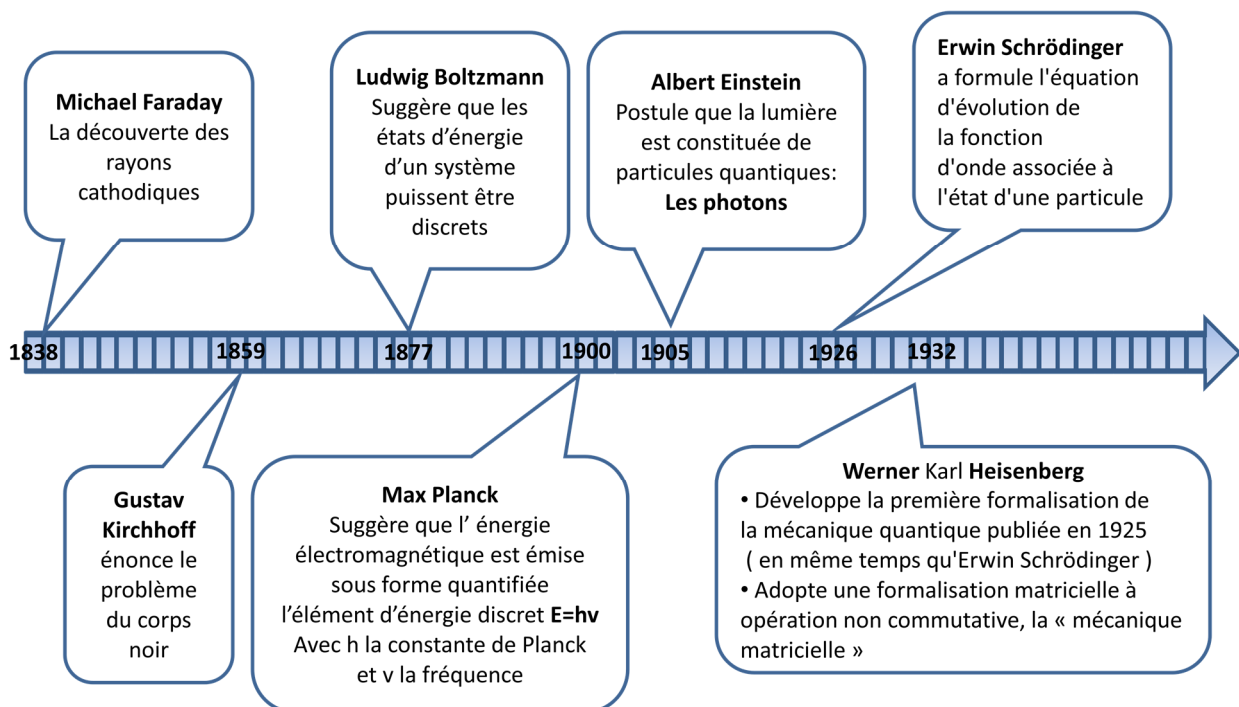
1 Introduction historique

Vers la fin du XIX^e siècle, les physiciens distinguaient deux entités: matière et rayonnement qui possèdent des lois complètement différentes. Pour prévoir le mouvement des corps matériels, on utilisait les lois de la mécanique newtonienne qui détermine la trajectoire d'une particule soumise à l'action d'une autre à partir du principe de Newton. En ce qui concerne le rayonnement, la théorie de l'électro-magnétisme avait abouti, grâce à l'introduction des équations de Maxwell, à une compréhension de phénomènes en électricité, magnétisme et optique. En fin les interactions entre rayonnement et matière s'interprétaient bien à partir de la force de Lorentz. Compte tenu des expériences de l'époque cet ensemble de lois avaient donné des résultats satisfaisants.

Le début du XX^e siècle est marqué par des bouleversements profonds qui aboutirent à l'introduction de la mécanique relativiste et la mécanique quantique qui montrent les limites de la mécanique classique. En effet les lois classiques cessent d'être valables pour des corps matériels animés de très grandes vitesses, comparable à celle de la lumière (Domaine relativiste). Les lois classiques ne sont plus fiables à l'échelle atomique ou subatomique (domaine quantique).

Dans les deux cas la physique classique apparaît comme une approximation des nouvelles théories. On ne dispose pas encore, à l'heure actuelle, d'une théorie pleinement satisfaisante qui soit à la fois quantique et relativiste. Cependant la mécanique non relativiste que nous étudierons dans ce qui suit permet d'expliquer la plupart des phénomènes atomiques et moléculaires.

Ici quelques dates importantes de la chronologie du fondement de la mécanique quantique



2 Théorie du Rayonnement Thermique et Théorie de Quantification

Par définition un corps noir “ idéal” est un corps qui absorbe toutes les radiations qu’il reçoit. On le réalise artificiellement en considérant une cavité vide percée d’un petit trou. Toute radiation pénétrant par ce trou n’aura presque pas de chance d’en sortir après avoir été affaiblie par plusieurs réflexions successives sur les parois internes de cette cavité

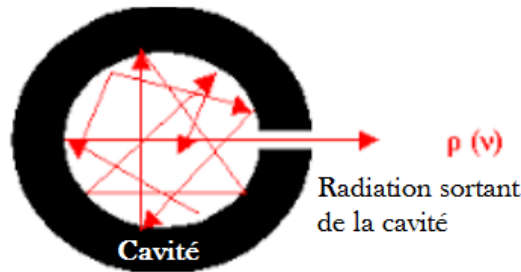


Fig. 1 : modele physique du corps noir

Une cavité portée à une température T très grande émet des radiations qui sont régies par les lois dites du rayonnement des corps noirs.

a) Loi de Stefan-Boltzmann:

La densité d'énergie (u) du rayonnement du corps noir est proportionnelle à T^4

$$u = a \cdot T^4 \quad (1)$$

b) La densité d'énergie du rayonnement thermique mesurée expérimentalement présente une forme universelle suivante

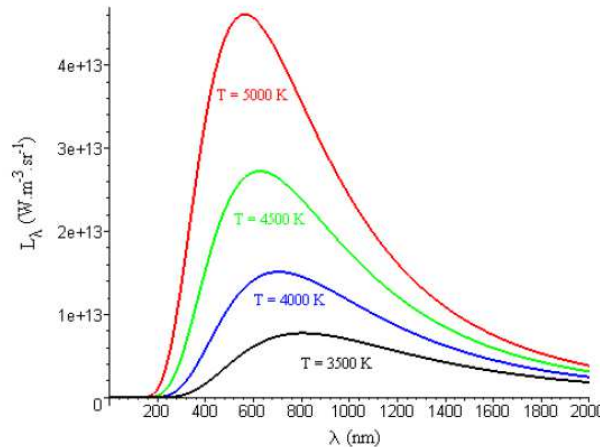


Fig. 2 : Densité spectrale d'énergie $I(\lambda)$ du “rayonnement du corps noir” en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la température T

- c) Les premières caractéristiques théoriques classiques de cette courbe ont été obtenues par Wien: Le déplacement du maximum suit une loi avec $\lambda_{\max} T = 2,898 \times 10^{-3} \text{ m.K}$
Où λ_{\max} est la longueur d'onde pour laquelle l'intensité du rayonnement émis par le corps noir à une température T est maximale.
- d) En se basant sur les lois classiques supposant l'évolution continue de l'énergie, **Rayleigh et Jeans** ont déduit une forme générale de la densité spectrale d'énergie du rayonnement :

$$U(\nu, T) = \frac{8\pi K_B T}{C^3} \nu^2$$

Cette expression décrit parfaitement la forme expérimental de $U(\nu, T)$ juste pour de très faibles fréquences. La théorie classique est donc incapable de décrire la courbe $U(\nu, T)$ en sa totalité, cependant:

- La théorie classique n'expliquait pas les données expérimentales.
- Pour de grandes longueurs d'onde, la loi de Rayleigh-Jeans convenait.
- Mais elle est totalement inadéquate pour des courtes longueurs d'onde (tend vers l'infini).
- Pour des très courtes longueurs d'onde, l'observation indiquait une énergie nulle.

Cette contradiction est appelée « *catastrophe ultraviolette* ».

e) Quantification de l'énergie - Loi de Planck

Pour surmonter cette impasse, Max Planck introduit la notion de la quantification de l'énergie. Il annonce l'hypothèse suivante: Les parois du corps noir sont assimilées à des oscillateurs harmoniques qui vibrent et passent d'un état de fréquence déterminé à un autre en émettant ou absorbant un quantum d'énergie $h \cdot \nu$ (l'énergie ne peut varier que d'une façon discontinue) ou ν est la fréquence de l'oscillateur et h le quantum de l'action ou constante de Planck ($h = 6,62 \times 10^{-34}$ J.s). Partant de cette hypothèse Planck établit la loi du rayonnement des corps noirs

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

Cette expression permet de décrire en détail et en sa totalité la courbe expérimentale $U(\nu, T)$. Ce succès spectaculaire de la théorie de Planck a donné naissance à la Physique Quantique

3 Aspect Corpusculaire de la Lumière

Vers 1905 A. Einstein va encore plus loin en partant des idées de Planck. Il annonce sa découverte du photon.

3.1 Définition du photon

Le photon est un corpuscule élémentaire du rayonnement lumineux de vitesse dans le vide C et de masse m_0 qui est nulle au repos, il possède une quantité d'énergie élémentaire $E=h\nu$

La découverte du photon a permis l'explication de l'effet photoélectrique observé expérimentalement par Hertz (1887) et l'effet Compton.

3.2 Effet photoélectrique

L'effet photoélectrique a été découvert par Hertz lors de ses recherches sur les ondes électromagnétiques. Alors que la mise en évidence de ces dernières a validé de façon éclatante la théorie de Maxwell, l'effet photoélectrique était désobéissant à toute interprétation maxwellienne. Tandis que les ondes électromagnétiques contenaient les semences de la relativité restreinte, l'effet photoélectrique contenait ceux de la mécanique quantique !

Definition

On appelle **effet photoélectrique** l'émission d'électrons par la matière (Plaque métallique expl : Fe, Zn,...) sous l'effet de la lumière.

Résultats expérimentaux:

Entre 1899 et 1902, en utilisant des tubes ayant un vide poussé, Lenard fait toute une série d'observation :

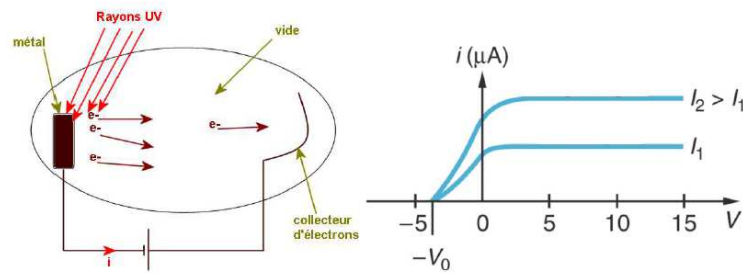
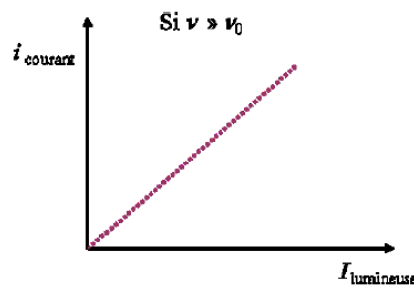


Fig. 3 : Effet photoélectrique: une onde lumineuse excite des électrons du métal. On mesure le photocourant en fonction de la fréquence ν de l'onde électromagnétique.

- Le phénomène n'apparaît pas dans l'obscurité, en revanche l'éclairement de la plaque métallique entraîne un courant I (nombre d'électrons émis par unité de temps)
- Le phénomène n'apparaît que lorsque la fréquence de la lumière incidente est supérieure à une fréquence précise, ν_0 , appelée seuil photoélectrique, dépendant de la nature du métal. Si $\nu < \nu_0$, l'effet photoélectrique ne se produit pas, quelle que soit l'intensité lumineuse (Fig: 3).
- Si $\nu \geq \nu_0$: - l'émission est quasi instantanée, même à faible intensité lumineuse.
 - L'énergie cinétique des électrons est indépendante de l'intensité lumineuse
 - Si $\nu \geq \nu_0$, L'énergie cinétique des électrons des photoélectrons augmente quand la fréquence lumineuse augmente.
- Si $V > 0$ pour une valeur suffisamment élevée de V , tous les photoélectrons émis atteignent l'anode, et le courant I atteint une valeur maximale. Si on augmente davantage V le courant demeure constant. Cependant, la valeur maximale du courant est proportionnelle à l'intensité lumineuse.
- Si $V < 0$ Seulement les e^- avec une énergie cinétique initiale $K_e = 1/2 m v^2 > |eV|$ atteignent l'anode. Si $|V| > |V_0|$ aucun électron n'atteint l'anode. Le potentiel d'arrêt V_0 est indépendant de l'intensité lumineuse.



Echec de la théorie électromagnétique et succès de la théorie d'Einstein

La théorie électromagnétique est insuffisante pour expliquer ces faits. Elle stipule en effet que :

- l'onde lumineuse est une onde électromagnétique (\vec{E}, \vec{B}) et la force qui s'exerce sur l'électron est $\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B})$. Les électrons peuvent être extraits du métal (v : vitesse de l'électron et q sa charge avec $q=1,6 \cdot 10^{-19} \text{C}$)
- L'énergie transportée par l'onde est proportionnelle à son intensité, l'émission de photoélectrons devrait être observée pour toute fréquence pourvu que l'intensité soit suffisante.
- Si l'intensité lumineuse est faible, l'énergie transmise aux électrons est faible, et leur amplitude d'oscillation également, il faudrait qu'un électron reçoive pendant longtemps une faible énergie avant que l'énergie accumulée soit suffisante pour l'extraire du métal.

- Quand on envoie, sur un métal, une onde lumineuse d'intensité croissante, alors \vec{E} et \vec{B} augmenteront ce qui implique que la force \vec{F} augmente. Les électrons seront, par conséquent, accélérés. Ce résultat est en contradiction avec les observations expérimentales
- Dans la théorie classique, l'énergie de l'onde lumineuse ne dépend pas de sa fréquence.

Conclusion: "La théorie ondulatoire de la lumière ne réussit pas à expliquer l'émission photoélectrique" car elle est :

- Incapable d'expliquer la fréquence seuil:**
Avec le temps, l'électron pourrait toujours acquérir suffisamment d'énergie pour s'échapper.
- Incapable d'expliquer pourquoi le potentiel d'arrêt V_0 est indépendant de l'intensité lumineuse:**
Puisque I est proportionnel au carré de l'amplitude (A^2), pour une même fréquence, si I augmente alors l'énergie devrait augmenter.
- Incapable d'expliquer l'émission instantanée:**
Le retard d'émission calculé est beaucoup plus grand que celui mesuré expérimentalement.

Explication quantique (Einstein 1905)

En se basant sur l'idée de *quantifier* l'énergie de Planck, Einstein suggéra (en 1905) que la quantification est une propriété fondamentale de l'énergie électromagnétique.

Les collisions entre les quanta de lumière (photon) et les électrons du métal sont de type mécanique où l'énergie et la quantité de mouvement se transmettent et se conservent.

Ainsi, à basse fréquence ($\nu < \nu_0$), les photons incidents n'ont pas suffisamment d'énergie à communiquer aux électrons pour les faire passer la barrière de potentiel ϕ qui les retient dans le métal (explication de la fréquence seuil ν_0)

$$E = h\nu$$

où $h = 6.626176 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$ est la constante de Planck. Il faut, pour arracher l'électron du métal (où il est soumis à des forces intermoléculaires), une énergie plus grande que l'énergie de liaison entre l'électron et l'atome, appelée travail d'extraction, W . L'énergie cinétique de l'électron qui s'échappe du métal s'écrit donc :

$$E_k = h\nu - W$$

C'est l'équation d'Einstein pour rendre compte de l'effet photoélectrique. On peut interpréter W de la manière suivante : quand l'électron quitte le métal, il laisse celui-ci chargé positivement et y est rappelé par un champ électrique. Ce dernier est le résultat d'une différence de potentiel, et on peut définir le travail d'extraction comme le travail nécessaire à l'électron pour vaincre la barrière de potentiel V entre le métal et un point immédiatement voisin :

$$W = eV$$

où V est le potentiel d'extraction (qui varie d'un métal à l'autre). L'équation d'Einstein explique les phénomènes incompréhensibles par la physique classique :

- existence d'un seuil photoélectrique: $h\nu \geq W \rightarrow \nu \geq \frac{W}{h} = \frac{eV}{h} \rightarrow \nu_0 = \frac{eV}{h}$

- effet immédiat : toute l'énergie lumineuse est concentrée dans le photon.

- si V_m est la vitesse d'un photoélectron n'ayant pas subi de freinage, son énergie cinétique est

$$\frac{1}{2} m V_m^2 = h\nu - W = h(\nu - \nu_0) \rightarrow V_m = \sqrt{\frac{2h(\nu - \nu_0)}{m}}$$

- la vitesse maximale des photoélectrons augmente quand la fréquence augmente, mais ne dépend pas de l'intensité lumineuse.

Millikan vérifia, en 1916, l'équation d'Einstein de la manière suivante : Il envoya sur un même métal un rayonnement de fréquence décroissante, jusqu'à ce qu'il n'observe plus d'électrons arrachés (l'intensité du courant dans le circuit relié à la plaque est nul). A ce moment, $\nu = \nu_0$ pour le métal considéré. En traçant un graphique de E_k en fonction de ν , il obtient une droite dont la pente est égale à h et qui coupe l'axe des E_k en W . L'expérience répétée avec d'autres métaux donne des droites parallèles.

L'effet photoélectrique a donc montré que le photon agit comme un corpuscule.

Exemple 1: Calculez l'énergie d'un photon si:

a) $\lambda = 400 \text{ nm}$

b) $\lambda = 700 \text{ nm}$

Remarque: $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$

Solution:

La lumière visible contient des photons dont l'énergie varie entre: 1,77 et 3,1 eV

$$\lambda = 400 \text{ nm} \rightarrow E = 3,1 \text{ eV}$$

$$\lambda = 700 \text{ nm} \rightarrow E = 1,77 \text{ eV}$$

Exemple 2:

L'intensité de la lumière solaire à la surface terrestre est environ 1400 W/m^2 .

Si l'énergie moyenne d'un photon est de 2 eV ($\lambda = 600 \text{ nm}$), calculez le nombre de photons frappant une surface de 1 cm^2 à chaque seconde.

Solution:

à chaque seconde $1400 \text{ J/m}^2 = 0,14 \text{ J/cm}^2$. Si N est le nombre de photons de 2 eV d'énergie qui possèdent au total $0,14 \text{ J}$ ($8,75 \times 10^{17} \text{ eV}$).

On trouve $N = 4,38 \times 10^{17}$ photons (à chaque seconde).

3.3 Effet Compton,

En éclairant un bloc de graphite (cf. figure I.5) avec un faisceau de rayons X (raie K_α du molybdène de longueur d'onde $\lambda = 0,71 \text{ \AA}$) monochromatiques de longueur d'onde λ et en observant le spectre des radiations diffusées sous un angle θ ,

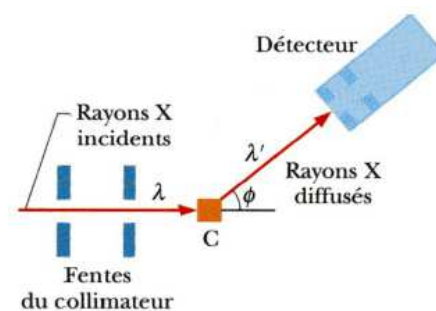


Fig.I.5 : Expérience de Compton

A.H. Compton découvrit, en 1923, le spectre indiqué à la figure I.6(a) et figure I.6(b).

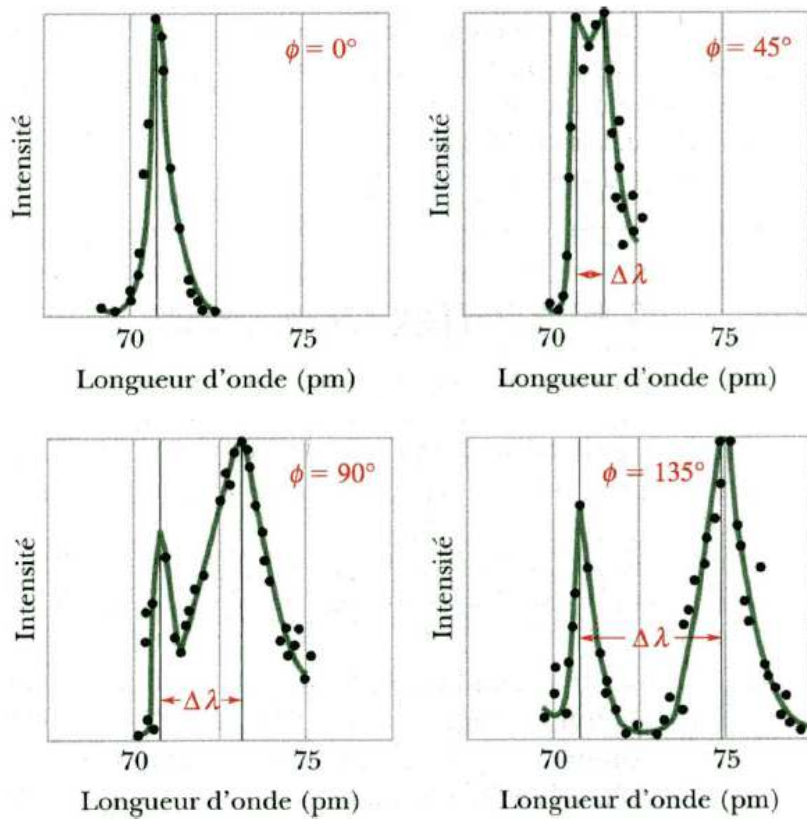
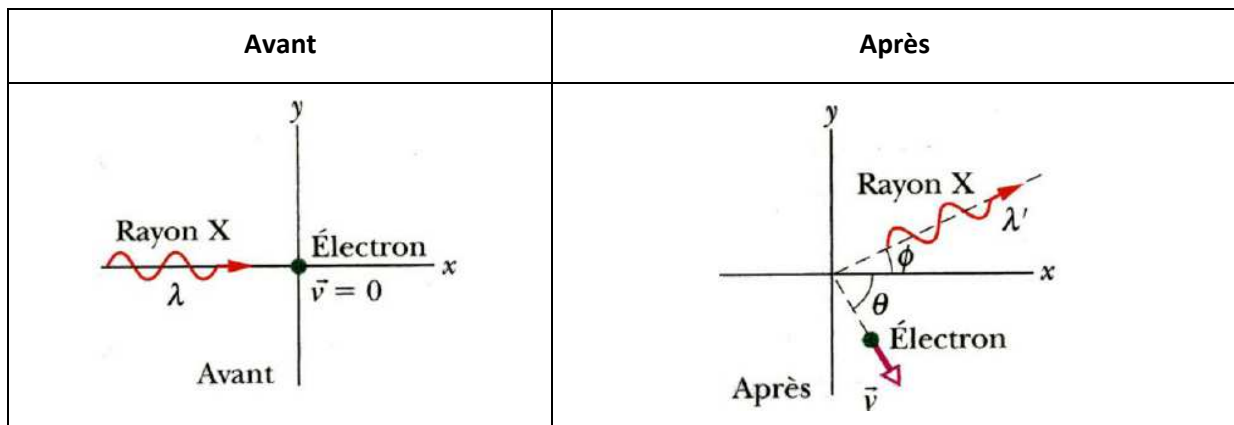


Fig.I.6 : Effet Compton : Mesure de Compton pour différents θ

Selon la théorie classique, les électrons soumis au champ électrique oscillant de l'onde incidente se mettent à vibrer en synchronisme avec ce champ ; par suite de cette vibration forcée, ils rayonnent à leur tour de la lumière de même fréquence. L'origine de la raie non déplacée est donc claire. Mais l'origine de la raie déplacée reste obscure.

La théorie des photons d'Einstein en fournit une interprétation particulièrement simple, ainsi que Compton l'a lui-même montré. Suivant cette théorie, la diffusion est considérée comme résultant du choc de chaque photon avec un des électrons libres du graphite, comme indiqué schématiquement à la figure 1.7.

Au cours de la collision, l'électron est projeté dans une certaine direction (faisant un angle ϕ avec la direction du photon incident d'énergie $E = h\nu$), emportant avec lui une certaine énergie cinétique T et impulsion \vec{p}_e tandis que le photon dévié par le choc continue sa course avec l'énergie restante qui résulte de la loi de conservation de l'énergie, appliquée à la collision.



| | |
|--|---|
| <i>Electron:</i> $E_e^0 = m_0 c^2, \vec{P}_e^0 = \vec{0}$ <i>photon:</i> $E_{ph}^0 = h\nu_0, \vec{P}_{ph}^0 = \frac{h\nu_0}{c} \vec{k}$ | <i>électron:</i> $E_e = m \cdot c^2, \vec{P}_e = m \cdot \vec{v} = m \cdot v \cdot \vec{e}_\varphi$ <i>photon:</i> $E_{ph} = h\nu, \vec{P}_{ph} = \frac{h\nu}{c} \vec{e}_\theta$ |
|--|---|

Conservation de l'énergie : (système isolé) (choc élastique)

$$h\nu_0 + m_0 c^2 = h\nu + m c^2$$

$$\text{avec } m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

Conservation des impulsions:

$$\vec{P}_{ph}^0 = \vec{P}_e + \vec{P}_{ph} \Rightarrow \frac{h\nu_0}{c} \vec{e}_x = m \cdot v \cdot \vec{e}_\varphi + \frac{h\nu}{c} \vec{e}_\theta \text{ équation vectorielle}$$

$$\text{Projection / } \vec{e}_x \Rightarrow \frac{h\nu_0}{c} = m \cdot v \cdot \cos\phi + \frac{h\nu}{c} \cos\theta$$

$$\text{Projection / } 0 = m \cdot v \cdot \sin\phi - \frac{h\nu}{c} \sin\theta$$

$$\Rightarrow \Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \left(\frac{h}{m_0 c}\right) \cdot (1 - \cos\phi)$$

$$\text{avec } \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} = 2,43 \text{ pm } c \text{ est la longueur d'onde Compton}$$

4 Généralisation du Double Aspect Ondulatoire Et Corpusculaire

4.1 Aspect ondulatoire de la matière: Onde de matière

Le Photon représente la nature corpusculaire de la lumière qui est déjà ondulatoire. En cherchant à établir une théorie unifiée de la matière et du rayonnement, Louis De Broglie a généralisé la notion de dualité onde -corpuscule à la matière:

- à toute particule matérielle d'énergie E et d'impulsion \vec{P} il associe une "Onde de matière" que nous notons $\psi(\vec{r}, t)$ de fréquence ν et de vecteur d'onde \vec{k} , une telle correspondance est représentée comme suit :

$$\left. \begin{array}{l} \text{Le corpuscule} \\ \text{Variables dynamiques} \\ \text{des corpuscules} \\ \text{(E et } \vec{P}\text{)} \\ \text{Energie et impulsion} \end{array} \right\} \text{ et } \left\{ \begin{array}{l} \text{L'onde} \\ \text{grandeurs caractéristiques} \\ \text{de l'onde de matière} \\ \text{associée} (\omega \text{ et } \vec{k}) \\ \text{fréquence et vecteur d'onde} \end{array} \right.$$

$$\left. \begin{array}{l} E = h\nu = \frac{h}{2\pi} \omega = \hbar\omega \\ \vec{P} = \hbar\vec{k} \end{array} \right\} \rightarrow |\vec{k}| = k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ et } |\vec{P}| = \hbar|\vec{k}| = \frac{h}{\lambda} \text{ avec } \omega = 2\pi\nu$$

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad \text{Loi de Louis de Broglie}$$

m : masse de la particule et v sa vitesse.

La théorie de De Broglie sera vérifiée expérimentalement en 1927 par Davisson et Germer, grâce à la découverte du phénomène de diffraction des électrons. Ces phénomènes sont analogues à diffraction de la lumière (photon)

Question: quand doit on appliquer la mécanique quantique? et quand doit on appliquer la mécanique classique?

D'une manière générale, on peut fixer grossièrement les limites dans lesquelles la mécanique quantique doit être appliquée: Soit λ la longueur d'onde associée à l'objet matériel étudié et soit d l'ordre de grandeur des distances mises en jeu, nous avons alors:

- si $\lambda \sim d$: on doit appliquer la mécanique quantique
- si $\lambda \ll d$: on doit appliquer la mécanique classique

4.2 Onde de Matière et Equation de Schrödinger

Partant des idées de L. De Broglie, associant à chaque particule une onde de matière, Schrödinger établit l'équation de propagation de l'onde de matière.

- à chaque particule est associée une fonction d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$ décrivant l'état quantique de la particule et remplaçant la notion de trajectoire en mécanique classique (Max Born).
- Son intensité $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ en un point \vec{r} et à l'instant t donné représente la densité de probabilité de trouver la particule associée en ce point et à cet instant
- $dP(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ est la probabilité de trouver la particule dans l'élément de volume $d^3\vec{r}$ au temps t donné.
- $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1$ car la particule se trouve certainement quelque part dans l'espace.
- Connaissant $\Psi(\vec{r}, t_0)$ à t_0 il faut déterminer $\Psi(\vec{r}, t)$ à un instant t donné, (la fonction $\Psi(\vec{r}, t)$ détermine complètement l'état dynamique de la particule). D'où il faut connaître l'équation de propagation de $\Psi(\vec{r}, t)$ qui doit être:
 - linéaire et homogène : $\Psi(\vec{r}, t)$ possède la propriété de superposition caractéristique des ondes en général. Si Ψ_1 et Ψ_2 sont solution de l'équation alors pour $\forall \lambda_1 ; \lambda_2$ nous aurons $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ solution de l'équation.
 - Une équation différentielle du premier ordre par rapport au temps permettra à partir de la connaissance de $\Psi(\vec{r}, t_0)$ la détermination $\Psi(\vec{r}, t) \forall t$.

L'équation de propagation de l'onde d'une particule de masse m et subissant le potentiel $V(\vec{r}, t)$ est:

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

C'est l'équation fondamentale appelée équation de Schrödinger, avec $(\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})$.

Cas particulier d'une particule libre c'est une particule dont l'énergie est purement cinétique (pas de potentiel i.e. $V(\vec{r}, t) = 0$), l'équation de Schrödinger sera:

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

Cette équation est la traduction de l'équation classique $E = \frac{p^2}{2m}$, ou E et P sont représentés dans la mécanique quantique par les opérateurs différentiels agissant sur Ψ :

$$E \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad \vec{P} \longrightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$

L'équation de Schrödinger (I.5) admet pour solution: $\Psi(\vec{r}, t) = C e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$ avec $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$, $\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $E = \frac{p^2}{2m}$

$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = |C|^2$: Densité de probabilité de présence uniforme dans tout l'espace! ce résultat n'est pas physique. Une telle onde ne peut pas représenter une particule car elle n'est pas de carré sommable. $\int |C|^2 d^3r$ Diverge.

Mais d'après le principe de superposition, toute superposition d'ondes de type (I.6) est solution de l'équation de Schrödinger. On peut donc considérer une superposition d'une infinité d'ondes planes et on peut donc écrire:

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

C'est un "paquet d'ondes" à 3 dimensions qui est une superposition linéaire d'ondes planes de vecteurs d'ondes voisins. La fonction $g(\vec{k})$ est complexe ou réelle. $|g(\vec{k})|$ n'a par hypothèse de valeurs notables que dans un petit domaine autour de \vec{k}_0

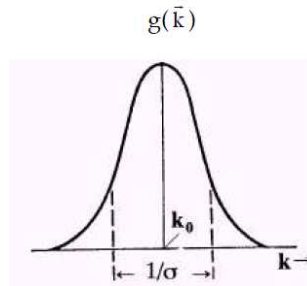


Fig : I.8 : Fonction de distribution dans l'espace des impulsions $p = k$ pour un paquet d'ondes gaussien

On voit aussi que $g(\vec{k})$ n'est autre que la transformée de fourrier de $\Psi(\vec{r}, t)$ car:

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

4.3 4.4 Vitesse de groupe, Vitesse de phase

Un paquet d'onde présente un maximum central qui correspond à l'interférence constructive des différentes ondes (harmoniques) dont il est composé. La vitesse de groupe V_g est égale à:

$$V_g = \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k=k_0} = \frac{dE}{dP}$$

Où $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ pour une particule libre. k_0 est le vecteur d'onde pour lequel la fonction $|g(\vec{k})|$ est maximum.

La vitesse de phase d'une onde plane c'est la vitesse de propagation des plans d'égale phase, plans d'ondes. $V_\phi = \left(\frac{dx}{dt} \right)_{k=k_0} = \frac{\omega}{k}$

Remarque: la vitesse de groupe est la quantité physique intéressante car elle représente la vitesse à laquelle se déplace l'endroit où se localise l'énergie (pour les ondes acoustiques ou électronique). En mécanique quantique elle représente la vitesse de déplacement de la probabilité de présence associée à l'onde (voir TD).

Chapitre II: Bases mathématiques de la théorie quantique

1 Vecteurs et opérateurs dans l'espace de Hilbert

Espace de Hilbert: est un espace vectoriel doué de deux propriétés :

a) produit scalaire : à deux vecteurs \vec{u} et \vec{v} pris dans cet ordre correspond un produit scalaire : $\vec{u} \cdot \vec{v}$ qui est un nombre qui peut être complexe.

Ce produit scalaire est associatif : $\vec{u} \cdot (a\vec{v} + b\vec{w}) = a\vec{u} \cdot \vec{v} + b\vec{u} \cdot \vec{w}$

b) le produit scalaire est soumis à la condition :

$\vec{u} \cdot \vec{v} = (\vec{v} \cdot \vec{u})^*$ Le complexe conjugué

$\vec{u} \cdot \vec{u} = (\vec{u} \cdot \vec{u})^*$ C'est la norme de \vec{u} , c'est un nombre réel.

Si la dimension de l'espace vectoriel est finie on peut trouver un ensemble complet de vecteurs \vec{u} tel que :

$$\begin{cases} \vec{u}_i \cdot \vec{u}_i = 1 \\ \vec{u}_i \cdot \vec{u}_j = 0 \text{ si } i \neq j \end{cases} \quad \text{Base orthonormée}$$

Ils constituent une base de vecteurs unitaires orthogonales deux à deux

2 Espace des Fonctions D'onde F

2.1 Définition:

les fonctions d'onde de la mécanique quantique sont des fonctions de carré sommables, de telles fonctions appartiennent à un espace vectoriel normé et complet

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} \text{ Converge}$$

Où $d^3\vec{r} = dx dy dz$ élément de volume. Donc $\psi(\vec{r}, t) \in L^2(\mathbb{R}^3)$: espace fonctionnel possédant la structure de l'espace de Hilbert.

Conséquences.:

$F = \{\psi(\vec{r}, t) / \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r} = 1\}$ où les fonctions $\psi(\vec{r}, t)$ sont telle que:

- partout définies,
- continues
- de classe C^∞ : indéfiniment dérivable,
- à support borné: on est sûr que la particule se trouve dans un domaine défini.

$F \subset L^2 \implies F$ est un sous espace vectoriel de $L^2(\mathbb{R}^3)$

2.2 Le produit scalaire:

Soit $\psi(\vec{r}, t)$ et $\varphi(\vec{r}, t)$ deux éléments de F : le produit scalaire de $\psi(\vec{r}, t)$ par $\varphi(\vec{r}, t)$ est:

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

Le produit scalaire est linéaire par rapport à ψ et antilinéaire par rapport à ϕ

$$\begin{aligned}(\phi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) &= \lambda_1 (\phi, \psi_1) + \lambda_2 (\phi, \psi_2) \\ (\lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2, \psi) &= \lambda_1^* (\phi_1, \psi) + \lambda_2^* (\phi_2, \psi)\end{aligned}$$

La norme $\longrightarrow (\psi, \psi) = \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$

2.3 Opérateurs linéaires sur F

a) Définition: A est opérateurs linéaire

$$\begin{aligned}F &\longrightarrow F \\ \Psi &\longrightarrow \Psi' = A\Psi\end{aligned}$$

$$A(\lambda\psi(\vec{r}, t) + \mu\phi(\vec{r}, t)) = \lambda A\psi(\vec{r}, t) + \mu A\phi(\vec{r}, t)$$

Exemples:

$$\text{- opérateur Dérivation: } D_x \quad D_x \psi(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial x} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{- opérateur multiplication par } x: \quad X \cdot \Psi(x, y, z) = x \Psi(x, y, z)$$

b) Produit d'opérateurs: Soient A, B deux opérateurs linéaires. Pour appliquer le produit AB sur la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$:

$$(AB) \psi(\vec{r}, t) = A(B \psi(\vec{r}, t))$$

on fait agir B sur $\psi(\vec{r}, t)$ puis A sur le résultat

En général $AB \neq BA$. On appelle commutateur de A et B l'opérateur $[A, B]$ telle que: $[A, B] = AB - BA$

$$\text{Exemple } [X, D_x] \psi(\vec{r}, t) = \left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi(\vec{r}, t) = -\psi(\vec{r}, t)$$

$$\longrightarrow [X, D_x] = -1$$

2.4 Base discrète de l'espace vectoriel F

a) Définition: Soit un ensemble de fonctions $U_i(\vec{r})$ de F avec $i \in I = \{1, 2, \dots, n\}$ et $I \subset \mathbb{N}$. L'ensemble $\{U_i(\vec{r})\}$ est une base discrète si et seulement si:

$$\text{- } \forall \psi(\vec{r}) \in F \quad \exists! \{C_i\}_{i \in I} \subset \mathbb{C} \text{ telque } \psi(\vec{r}) = \sum_i C_i U_i(\vec{r})$$

$$\text{- Si } \exists \{C_i\}_{i \in I} \subset \mathbb{C} \text{ telque } \sum_i C_i U_i(\vec{r}) = 0 \text{ alors } C_i = 0 \quad \forall i$$

Remarque: $\{U_i(\vec{r})\}$ est orthonormée si $\forall ij \in I = \{1, 2, \dots, n\}$

$$(U_i, U_j) = \int U_i^*(\vec{r}) U_j(\vec{r}) d^3\vec{r} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \text{ Symbole de Kronecker } \square \square$$

On montre que $(U_j, \psi(\vec{r})) = (U_j, \sum_i C_i U_i(\vec{r})) = \sum_i C_i (U_j, U_i(\vec{r})) = C_j$

$$\longrightarrow C_i = (U_i, \psi(\vec{r})) = \int U_i^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

Conséquences

- $\psi(\vec{r}) = \sum_i C_i U_i(\vec{r}) = \sum_i (U_i, \psi(\vec{r})) U_i(\vec{r})$

- $\{U_i\}_{i \in I}$ est une base dans F si et seulement si elle vérifie la relation de fermeture:

$$\sum_i U_i(\vec{r})U_i^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

Démonstration:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_i c_i U_i(\vec{r}) = \sum_i (U_i, \psi(\vec{r})) U_i(\vec{r}) = \sum_i \int U_i^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}' U_i(\vec{r}) \\ &= \int d^3\vec{r}' \psi(\vec{r}') \sum_i U_i^*(\vec{r}') U_i(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \psi(\vec{r}') f(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

ou $f(\vec{r} - \vec{r}')$ est la fonction caractéristique de $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$. On a donc:

$$\begin{cases} \sum_i U_i^*(\vec{r}') U_i(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ \psi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{cases}$$

Si un ensemble orthonormé $\{U_i(\vec{r})\}_{i \in I}$ vérifie la relation de fermeture il constitue une base.

2.5 Base continues Orthonormée ($\notin F$)

a) Définition: Tout un ensemble de fonctions $\{\omega_\alpha(\vec{r})\}$ où α est un indice continue ($\alpha \in \mathbb{R}$) vérifiant les relations suivantes:

$$\begin{cases} (\omega_\alpha, \omega_{\alpha'}) = \int \omega_\alpha^*(\vec{r}) \cdot \omega_{\alpha'}(\vec{r}) d^3r = \delta(\alpha - \alpha') & \text{relation de renormalisation} \\ \int \omega_\alpha^*(\vec{r}) \cdot \omega_\alpha(\vec{r}') d\alpha = \delta(\vec{r} - \vec{r}') & \text{relation de fermeture} \end{cases}$$

est dit base orthonormée continue.

Conséquences

- La norme: $(\omega_\alpha, \omega_\alpha) = \int \omega_\alpha^*(\vec{r}) \cdot \omega_\alpha(\vec{r}) d^3r = \delta(0) \rightarrow \infty \Rightarrow \{\omega_\alpha(\vec{r})\} \notin F$
- $\psi(\vec{r}) \in F$ on peut écrire $\psi(\vec{r}) = \int C(\alpha) \cdot \omega_\alpha(\vec{r}) d\alpha = \int (\omega_\alpha, \psi) \cdot \omega_\alpha(\vec{r}) d\alpha$

Démonstration:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \int d^3\vec{r}' \psi(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') = \int d^3\vec{r}' \psi(\vec{r}') \int \omega_\alpha^*(\vec{r}') \cdot \omega_\alpha(\vec{r}) d\alpha \\ &= \int \omega_\alpha(\vec{r}) d\alpha \int \psi(\vec{r}') \omega_\alpha^*(\vec{r}') d^3\vec{r}' = \int \omega_\alpha(\vec{r}) d\alpha (\omega_\alpha^*, \psi) = \int \omega_\alpha(\vec{r}) C(\alpha) d\alpha \end{aligned}$$

Produit scalaire

Soit $\varphi(\vec{r}) = \int \omega_\alpha(\vec{r}) b(\alpha) d\alpha$ et soit $\psi(\vec{r}) = \int \omega_{\alpha'}(\vec{r}) C(\alpha') d\alpha'$ leur produit scalaire est

$$\begin{aligned} (\varphi(\vec{r}), \psi(\vec{r})) &= \int \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int \int \omega_\alpha^*(\vec{r}) b^*(\alpha) d\alpha \int \omega_{\alpha'}(\vec{r}) C(\alpha') d\alpha' d^3\vec{r} \\ &= \int b^*(\alpha) d\alpha \int C(\alpha') d\alpha' \int \omega_\alpha^*(\vec{r}) \omega_{\alpha'}(\vec{r}) d^3\vec{r} = \int b^*(\alpha) d\alpha \int C(\alpha') d\alpha' \delta(\alpha - \alpha') \\ &= \int b^*(\alpha) C(\alpha) d\alpha \end{aligned}$$

Cas particulier: norme $(\psi, \psi) = \int C^*(\alpha) C(\alpha) d\alpha = \int |C(\alpha)|^2 d\alpha$

Exemple: $w_p(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$

$$\forall \psi \in F \quad \psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \psi(p) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

$$(\omega_p, \omega_{p'}) = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad \int \omega_p(\vec{r}) \cdot \omega_{p'}(\vec{r}') d^3\vec{p} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\forall \psi \in F \quad \psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(p) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

Conclusion- Résumé

Toutes les formules concernant les bases discrètes se généralisent en considérant les relations de correspondances suivantes:

Indice: $i \longleftrightarrow \alpha$

Sommation: $\sum_i \longleftrightarrow \int d\alpha$

Distribution $\delta_{ij} \longleftrightarrow \delta(\alpha - \alpha')$

3 Représentation de Dirac, Espace des Etats

a) Introduction :

Nous avons vu au chapitre, d'après ce qui précède, que la théorie quantique peut être développée de manière équivalente dans la représentation des coordonnées \vec{r} ou dans celle des impulsions \vec{p} . En fait, la représentation dans laquelle on travaille joue un rôle analogue au choix d'un système de coordonnées en géométrie. Or nous savons que les problèmes de géométrie peuvent être résolus à l'aide du calcul vectoriel, sans se préoccuper d'un système de coordonnées particulier.

$$\forall \psi \in F \quad \psi(\vec{r}, t) = \sum_i C_i U_i(\vec{r}, t) \quad C_i \text{ dans une base discrète}$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \int C(\alpha) \cdot \omega_\alpha(\vec{r}, t) d\alpha \quad C(\alpha) \text{ dans une base continue}$$

Il est donc logique de se demander si la théorie quantique ne peut pas être abordée sans faire usage d'une représentation particulière. C'était précisément le but que Dirac a poursuivi dans sa formulation de la théorie quantique.

Le problème est analogue à un point $P(x_i) \in \mathbb{R}^3$ où les coordonnées x_i dépendent de la base (référentiel) choisie. Mais la géométrie vectoriel (espace vectoriel) permet de faire des calculs sans tenir compte du référentiel ($|\vec{P}\vec{P}'|$ est indépendant de la base choisie). Par analogie on définit un espace abstrait E des états d'un système physique (particule): l'état quantique du système physique sera caractérisé par un vecteur état appartenant à E

Remarque: $F \subset L^2(\mathbb{R}) \implies E$ est un sous espace d'un espace de Hilbert (espace vectoriel normé complet)

b) Définitions

i) les éléments de E sont appelés vecteurs kets et notés $|\cdot\rangle$ à tout fonction $\psi(\vec{r}) \in F$ correspond un et un seul vecteur Ket $|\psi\rangle \quad \psi(\vec{r}) \Leftrightarrow |\psi\rangle$ (r indice continue, $\psi(\vec{r})$ est l'ensemble des composants de $|\psi\rangle$ sur une base).

La figure II.2 fournit une représentation géométrique du vecteur "ket" dans l'espace des coordonnées.

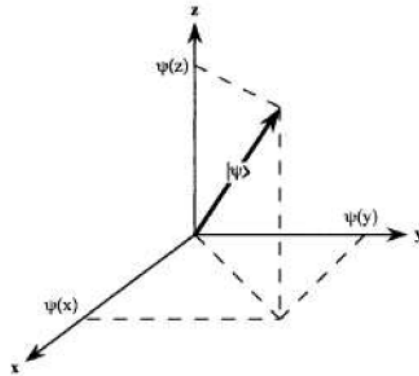


Figure II.3 : Représentation géométrique du vecteur d'état $|\psi\rangle$ dans l'espace de coordonnées.

ii) les vecteurs-bras notés $\langle \cdot |$ sont les éléments de l'ensemble dual E^* de E , ce sont donc des formes linéaires définies sur E (ou fonctionnelle définie sur E)

$$f: \begin{array}{l} E \rightarrow \mathbb{C} \\ |\psi\rangle \rightarrow f(|\psi\rangle) \end{array} \quad \text{linéaire}$$

Notation : le bras $\langle f| \in E^*$ et $f(|\psi\rangle) = \langle f|\psi\rangle \in \mathbb{C}$. c'est un nombre obtenu en agissant $\langle f| \in E^*$ sur $|\psi\rangle \in E$. L'expression $\langle \cdot |$ est nommée bracket (crochet)

c) Propriétés

• Produit scalaire dans E :

à tout ket $|\psi\rangle \in E$ on associe le bras $\langle\varphi| \in E^*$. $\langle\varphi|$ est la fonctionnelle linéaire qui au ket $|\psi\rangle$ associe le bracket $\langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$ qui est le produit scalaire ($\langle\varphi|, |\psi\rangle$) de $|\psi\rangle$ par $\langle\varphi|$.

$(\langle\varphi|, |\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle$: Notation de Dirac du produit scalaire

Remarque : soient $\lambda, \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

◆ la correspondance : Ket linéaire \Rightarrow Bras antilinéaire

$$\lambda_1|\phi_1\rangle + \lambda_2|\phi_2\rangle \Rightarrow \lambda_1^*\langle\phi_1| + \lambda_2^*\langle\phi_2|$$

◆ $|\lambda\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$

◆ $\langle\lambda\phi| = \lambda^*\langle\phi|$

◆ la correspondance $|\phi\rangle \Rightarrow \langle\phi|$ est une injection mais pas surjection

d) Opérateurs linéaires :

i) Définition : A est un opérateur linéaire tel que :

$$A: E \rightarrow E$$

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$$

la matrice de A entre $|\phi\rangle$ et $|\Psi\rangle$ est formée d'éléments: $\langle\phi| (A|\Psi\rangle) = (\langle\phi|A) |\Psi\rangle$

ii) Exemples d'opérateurs linéaires

projecteur orthogonal P_Ψ sur un ket $|\Psi\rangle$

Soit $|\Psi\rangle$ tel que $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ normé. On définit : $P_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ opérateur projection

$$\forall |\phi\rangle \in E : P_\Psi |\phi\rangle = |\Psi\rangle\langle\Psi|\phi\rangle$$

$$\text{Propre : } P_\Psi^2 = P_\Psi P_\Psi = P_\Psi$$

$$\text{Démonstration : } P_\Psi^2 = P_\Psi P_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi| = |\Psi\rangle\langle\Psi| = P_\Psi$$

Projecteur sur un sous espace

Soit $\{|\phi_i\rangle\}_{i \leq q}$ orthonormé : $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$ et soit l'opérateur linéaire $P_q = \sum_{i=1}^q |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$

$\forall |\psi\rangle \in E \quad P_q |\psi\rangle = \sum_{i=1}^q |\phi_i\rangle\langle\phi_i|\psi\rangle$ C'est la projection de $|\psi\rangle$ sur le sous espace E_q de E .

e) Opérateur adjoint A^\dagger de A

$$A : E \quad \text{-----} \rightarrow \quad E$$

$$|\Psi\rangle \quad \text{-----} \rightarrow \quad |\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$$

A: Opérateur linéaire

$$A^\dagger : E^* \quad \text{-----} \rightarrow \quad E^*$$

$$\langle\Psi| \quad \text{-----} \rightarrow \quad \langle\Psi'| = \langle\Psi|A^\dagger$$

: A^\dagger est opérateur linéaire adjoint de A

$$|\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle \Leftrightarrow \langle\Psi'| = \langle\Psi|A^\dagger \quad A^\dagger \text{ est le conjugué hermitique de } A$$

Propriétés.

- $\langle\Psi|\phi\rangle = \langle\Psi|\phi\rangle^*$
- $\langle\Psi|A^\dagger|\phi\rangle = (\langle\phi|A|\Psi\rangle)^*$
- $\langle A\Psi| = \langle\Psi|A^\dagger, |A\Psi\rangle = A|\Psi\rangle$
- $(A^\dagger)^\dagger = A, \quad (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$
- $(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$
- $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$ l'ordre change
- $\langle A^\dagger\phi|\Psi\rangle = \langle\phi|A\Psi\rangle$
- Conjugaison hermitique d'une expression

$$\text{soit } (\alpha\langle u|A|v\rangle + |W\rangle\langle\Psi|A|\phi\rangle)^\dagger = \langle\phi|A^\dagger|\Psi\rangle + \langle v|A^\dagger|u\rangle\alpha^*$$

- L'opérateur A est dit hermitique si et seulement si $A^\dagger = A$

Exp : $P_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|, P_\Psi^\dagger = |\Psi\rangle\langle\Psi| = P_\Psi$ donc P_Ψ est hermitique

4 Représentations dans L'espace des Etats

Représentation :

Le choix d'une représentation c'est le choix d'une base orthonormée $\{|U_i\rangle\}$ ou $\{|\omega_\alpha\rangle\}$:

- les vecteurs $|\Psi\rangle, \langle\Psi|$ seront représentés par leur composantes.
- les opérateur A, A^\dagger .. par leur éléments de matrice
- le calcul vectoriel devient un calcul matriciel

4.1 Caractérisation en notation de Dirac d'une base orthonormée :

a) relation d'orthonormalisation :

les ensembles $\{|U_i\rangle\}_{i \in \mathbb{C} \text{ IN}}$ et $\{|\omega_\alpha\rangle\}_{\alpha \in \mathbb{R}}$ sont dites orthonormés si :

$$\forall ij \quad \langle U_i | U_j \rangle = \delta_{ij} \quad \text{et} \quad \forall \alpha, \alpha' \quad \langle \omega_\alpha | \omega_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

Remarque: $\langle \omega_\alpha | \omega_\alpha \rangle$ n'existe pas ($\delta(0) \rightarrow \infty$) $\implies |\omega_\alpha\rangle \notin E$

b) Relation de fermeture :

Soit $|\psi\rangle \in E$ $\begin{cases} |\psi\rangle = \sum_i C_i |U_i\rangle & \text{avec } C_i = \langle U_i | \psi \rangle & \text{dans une base discontinu} \\ |\psi\rangle = \int C(\alpha) |\omega_\alpha\rangle d\alpha & \text{avec } C(\alpha) = \langle \omega_\alpha | \psi \rangle & \text{dans une base continu} \end{cases}$

$$\forall |\psi\rangle = \sum_i C_i |U_i\rangle = \sum_i \langle U_i | \psi \rangle |U_i\rangle = \sum_i |U_i\rangle \langle U_i | \psi \rangle = \left(\sum_i |U_i\rangle \langle U_i| \right) |\psi\rangle$$

$\implies \sum_i |U_i\rangle \langle U_i| = \mathbb{I}$ avec \mathbb{I} Opérateur identité

de meme

$$\forall |\psi\rangle = \int C(\alpha) |\omega_\alpha\rangle d\alpha = \int \langle \omega_\alpha | \psi \rangle |\omega_\alpha\rangle d\alpha = \int |\omega_\alpha\rangle \langle \omega_\alpha | \psi \rangle d\alpha = \left(\int |\omega_\alpha\rangle \langle \omega_\alpha| d\alpha \right) |\psi\rangle$$

$\implies \int |\omega_\alpha\rangle \langle \omega_\alpha| d\alpha = \mathbb{I}$ avec \mathbb{I} Opérateur identité

Ces deux relations sont appelés relation de fermeture

- réciproquement :

$$|\psi\rangle = \mathbb{I} |\psi\rangle = \left(\sum_i |U_i\rangle \langle U_i| \right) |\psi\rangle = \sum_i C_i |U_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \mathbb{I} |\psi\rangle = \left(\int |\omega_\alpha\rangle \langle \omega_\alpha| d\alpha \right) |\psi\rangle = \int C(\alpha) |\omega_\alpha\rangle d\alpha$$

4.2 Représentations des vecteurs ket et bras

a) Ket :

$\forall |\Psi\rangle \in E$, $|\Psi\rangle$ est représenté par une matrice unicolonne. Ses composantes sont les C_i dans $\{|U_i\rangle\}$ et $C(\alpha)$ dans la base $\{|\omega_\alpha\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle U_1 | \psi \rangle \\ \langle U_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle U_i | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle U_n | \psi \rangle \end{pmatrix} \qquad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle \omega_\alpha | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Dans la base $\{|U_i\rangle\}$ discrète

Dans la base $\{|\omega_\alpha\rangle\}$ continue

b) bras :

$\forall \langle \phi | \in E^*$, $\langle \phi |$ est représenté par la matrice uniligne. Ses composantes sont les C_i^* dans $\{|U_i\rangle\}$ et $C^*(\alpha)$ dans la base $\{|\omega_\alpha\rangle\}$:

$$\langle \phi | = (\langle \phi | U_1 \rangle, \dots, \langle \phi | U_i \rangle, \dots, \langle \phi | U_n \rangle)$$

Dans la base $\{|U_i\rangle\}$ discrète

$$\langle \phi | = (\dots, \langle \phi | \omega_\alpha \rangle, \dots)$$

Dans la base $\{|\omega_\alpha\rangle\}$ continue

$$\langle \phi | = \sum_i b_i^* \langle U_i | \text{ dans } \{|U_i\rangle\}$$

$$b_i^* = \langle \phi | U_i \rangle$$

$$\langle \phi | = \int b^*(\alpha) \langle \omega_\alpha | d\alpha \text{ dans } \{|\omega_\alpha\rangle\}$$

$$b^*(\alpha) = \langle \phi | \omega_\alpha \rangle$$

Afin d'obtenir le produit scalaire $\langle \phi | \Psi \rangle$ qui est un nombre et comme $|\Psi\rangle$ est matrice unicolonne il faut $\langle \phi |$ soit une matrice uniligne. $\langle \phi | \Psi \rangle$ est représenté par:

$$\langle \phi | \psi \rangle = (\langle \phi | U_1 \rangle, \langle \phi | U_2 \rangle, \dots, \langle \phi | U_i \rangle, \dots, \langle \phi | U_n \rangle) \begin{pmatrix} \langle U_1 | \psi \rangle \\ \langle U_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle U_i | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle U_n | \psi \rangle \end{pmatrix}$$

Dans la représentation $\{|U_i\rangle\}$ discrète et

$$\langle \phi | \psi \rangle = (\dots, \langle \phi | \omega_\alpha \rangle, \dots) \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle \omega_\alpha | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Dans la représentation $\{|\omega_\alpha\rangle\}$ continue.

4.3 Représentation des opérateurs

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \text{ Dans la base } \{|U_i\rangle\} \text{ ou } A = \begin{pmatrix} \dots & \dots & \dots \\ \vdots & A(\alpha, \alpha') & \vdots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \text{ Dans la base } \{|\omega_\alpha\rangle\}$$

A est représenté par une matrice carrée d'éléments:

$$A_{ij} = \langle U_i | A | U_j \rangle \text{ Dans la base } \{|U_i\rangle\} \text{ et } A(\alpha; \alpha') = \langle \omega_\alpha | A | \omega_{\alpha'} \rangle \text{ Dans la base } \{|\omega_\alpha\rangle\}$$

$$A^+ \text{ -----} \rightarrow (A^+_{ij}) = (A^*_{ji}) = \langle U_j | A | U_i \rangle^*$$

Remarque :

- Si A est hermitique ($A=A^+$), alors $A_{ij} = A^*_{ji}$. Les éléments symétriques par rapport à la diagonale A_{ii} sont complexes conjugués En particulier $A_{ii} = A^*_{ii} \in \mathbb{R}$

- La trace d'un opérateur : $Tr A = \sum_i A_{ii} = \sum_i \langle U_i | A | U_i \rangle$ Indépendante de la base choisie

4.4 Changement de représentation :

Il revient au problème de changement de base dans un espace vectoriel. Les nouvelles représentations des kets, bras et opérateurs (matrice) seront connus si l'on détermine la matrice de passage des nouvelles bases (nouvelles représentations) aux anciennes bases (ou inversement).

- a) Soit P la matrice de passage de la base orthonormée $\{|U_i\rangle\}$ à la base orthonormée $\{|V_k\rangle\}$ les éléments de P sont P_{ik} .

$$P_{ik} = \langle U_i | V_k \rangle \longrightarrow P = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & k & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ i & \cdot & ik & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

P est la matrice de passage, elle définit le changement de base.

- b) $(P^+_{ki}) = (P_{ik})^* = \langle V_k | U_i \rangle$

- c) **Propriété:** la matrice de passage P d'une base orthonormée à une autre base orthonormée est unitaire. On a donc:

$$P^+P = PP^+ = \mathbb{I} \quad \text{avec } \mathbb{I} \text{ c'est la Matrice unité}$$

Démonstration :

$$\text{Lemme: } (AB)_{ij} = \langle U_i | AB | U_j \rangle = \langle U_i | A \mathbb{I} B | U_j \rangle = \langle U_i | A \sum_k | U_k \rangle \langle U_k | B | U_j \rangle = \sum_k \langle U_i | A | U_k \rangle \langle U_k | B | U_j \rangle = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

$$(P^+P)_{ij} = \sum_l P^+_{il} P_{lj} = \sum_l \langle V_i | U_l \rangle \langle U_l | V_j \rangle = \langle V_i | \left(\sum_l | U_l \rangle \langle U_l | \right) | V_j \rangle = \langle V_i | \mathbb{I} | V_j \rangle = \delta_{ij}$$

- d) Nouvelles composantes des kets et bras

$$\bullet |\Psi\rangle \longrightarrow C_i = \langle U_i | \Psi \rangle \text{ dans } \{|U_i\rangle\} \text{ et } C(\kappa) = \langle \alpha_\kappa | \Psi \rangle \text{ dans } \{|\alpha_\kappa\rangle\}$$

$$\langle \alpha_\kappa | \psi \rangle = \sum_i P^+_{ik} \langle U_i | \psi \rangle$$

Démonstration :

$$\langle \alpha_\kappa | \psi \rangle = \langle \alpha_\kappa | \mathbb{I} | \psi \rangle = \sum_i \langle \alpha_\kappa | U_i \rangle \langle U_i | \psi \rangle = \sum_i P_{ki}^+ \langle U_i | \psi \rangle \quad \text{de}$$

$$\text{même } \langle U_i | \psi \rangle = \sum_k P_{ik} \langle \alpha_k | \psi \rangle$$

$$\bullet \langle \Psi | \longrightarrow \langle \psi | \alpha_\kappa \rangle = \sum_i \langle \psi | U_i \rangle P_{ik}$$

$$\bullet \text{Opérateur } A : A_{kl} = \langle \alpha_\kappa | A | \alpha_l \rangle = \sum_{ij} P^+_{ki} A_{ij} P_{jl}$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} \langle \alpha_\kappa | A | \alpha_l \rangle &= \langle \alpha_\kappa | \mathbb{I} A \mathbb{I} | \alpha_l \rangle = \langle \alpha_\kappa | \sum_i | U_i \rangle \langle U_i | A \sum_j | U_j \rangle \langle U_j | \alpha_l \rangle \\ &= \sum_{ij} \langle \alpha_\kappa | U_i \rangle \langle U_i | A | U_j \rangle \langle U_j | \alpha_l \rangle = \sum_{ij} P^+_{ki} A_{ij} P_{jl} \end{aligned}$$

$$\text{de même } \langle U_i | A | U_j \rangle = A_{ij} = \sum_{kl} P_{ik} A_{kl} P^+_{lj}$$

5 Spectre d'un Opérateur. Equation aux Valeurs Propres

5.1 Définition :

soit A une application linéaire de E dans E telle que:

$$A: E \longrightarrow E \quad \text{Opérateur linéaire}$$

$$|\Psi\rangle \longrightarrow |\Psi'\rangle = A|\Psi\rangle$$

- L'équation $A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$ s'appelle "équation aux valeurs propres a de l'opérateur A "
- $|\Psi\rangle \in E$ vérifiant l'équation aux valeurs propres s'appelle **ket propre**.
- L'ensemble de ces valeurs propres s'appelle **spectre de A**
- a est dite valeurs propres non dégénérée (simple) si tous les kets $|\Psi\rangle$ correspondants sont colinéaires.
- a est dite valeur propre dégénérée d'ordre g si-il existe g kets $|\Psi^i\rangle$ (avec $i=1, 2, \dots, g$) propres linéairement indépendants, comme le montre schématiquement la figure II.6:

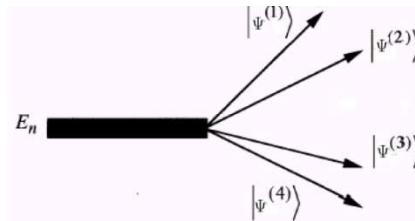


Figure II.6 : Dégénérescence du niveau d'énergie E_n : $g = 4$.

On a alors : $A|\Psi^i\rangle = a|\Psi^i\rangle$

- E_a : l'ensemble des kets propres $|\Psi^i\rangle$ est un espace vectoriel de dimension g (g : ordre de dégénérescence) appelé sous espace propre de la valeur propres a

Cas particulier Si $g=1$ alors a est non dégénéré

5.2 Equation aux valeurs propres de A, équation caractéristiques

Soit $A: E \longrightarrow E$ Opérateur linéaire

Question: quelles sont toutes les valeurs propres λ_i de A et les vecteurs propres

$|\Psi^i\rangle$ telle que: $A|\Psi^i\rangle = \lambda_i |\Psi^i\rangle$

soit la représentation $\{|U_i\rangle\}_{i \in I}$ avec I un ensemble fini. Soient $A, \lambda, |\Psi\rangle$ Tel que:

$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$ projection cette dernière équation sur $|U_i\rangle$

$$\langle U_i | A | \psi \rangle = \lambda \langle U_i | \psi \rangle, \quad \langle U_i | A | \psi \rangle = \lambda \langle U_i | \psi \rangle$$

on introduit la relation de fermeture

$$\implies \langle U_i | A (\sum_j |U_j\rangle \langle U_j|) | \psi \rangle = \sum_j \langle U_i | A | U_j \rangle \langle U_j | \psi \rangle = \sum_j A_{ij} C_j = \lambda \langle U_i | \psi \rangle$$

$$\implies \sum_j (A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) C_j = 0 \quad \text{Système de } n \text{ équations linéaire et homogène}$$

Le système admet une solution non nulle si et seulement si:

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad \text{Équation caractéristique (ou équation séculaire) de degré } N \text{ en } \lambda$$

5.3 Notion d'observables

a) cas d'un opérateur hermitique

Soit $A: E \longrightarrow E$ Opérateur linéaire hermitique tel que $A^\dagger = A$

- chaque valeur propre d'un opérateur hermitique est réelle

Démonstration: Soit $|\Psi\rangle \in E$, on a $A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$

$$\langle \Psi | A^\dagger = \langle \Psi | A = \langle \Psi | \lambda^*$$

$$\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | (A | \Psi \rangle) = \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle = (\langle \Psi | A) | \Psi \rangle = \lambda^* \langle \Psi | \Psi \rangle \implies \lambda \in \mathbb{R}$$

Autrement : $\langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle \Psi | A^\dagger | \Psi \rangle^* = \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle \in \mathbb{R}$

- ii. Deux kets propres associés à deux valeurs propres différentes d'un opérateur hermitique sont orthogonaux.

Démonstration: Soit $|\Psi\rangle \in E$, $\langle \phi | \in E^*$ on a $A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$ et $A|\phi\rangle = \mu|\phi\rangle$ avec $\mu \neq \lambda$

A est hermitique : $\langle \Psi | A = \lambda \langle \Psi |$ et $\langle \phi | A = \mu \langle \phi |$ (D'après Théorème i)

$$\left. \begin{aligned} \langle \phi | A | \psi \rangle &= \lambda \langle \phi | \psi \rangle \\ &= \mu \langle \phi | \psi \rangle \end{aligned} \right\} \implies \text{si } \lambda \neq \mu \text{ alors } \langle \phi | \psi \rangle = 0$$

$$(\lambda - \mu) \langle \phi | \psi \rangle = 0$$

b) Définition d'un observable

Soit A un opérateur hermitique, soit $\{a_n, n=1, 2, 3, \dots\}$ l'ensemble des valeurs propres de A (spectre de A discret). g_n désigne le degrés de dégénérescence de a_n et soit $\{|\Psi_n^i\rangle\}_{i=1,2,\dots,g_n} \subset E_n$ sous espace propre de a_n ($\dim E_n = g_n$).

Les $|\Psi_n^i\rangle$ sont linéairement indépendantes tel que : $\forall i : A|\Psi_n^i\rangle = a_n|\Psi_n^i\rangle$

- $\forall n, n' (n \neq n') : \langle \Psi_n^i | \Psi_{n'}^j \rangle = 0$ où $|\Psi_{n'}^j\rangle \in E_{n'}$ (espace propre de $a_{n'} \neq a_n$)
- Dans un espace propre E_n on peut toujours choisir $\{|\Psi_n^i\rangle\}_{i=1,2,\dots,g_n}$ orthonormé tel que: $\langle \Psi_n^i | \Psi_n^j \rangle = \delta_{ij}$

Avec de tel choix on aboutit à un système orthonormé de vecteurs propres de A vérifiant : $\langle \Psi_n^i | \Psi_n^j \rangle = \delta_{nn'} \delta_{ij}$

Définition: si le système $\{|\Psi_n^i\rangle\}$ de vecteur propre de A est une base dans E alors A est un observable. Ceci s'exprime par la relation de fermeture :

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{g_n} |\Psi_n^j\rangle \langle \Psi_n^i| = \mathbb{I}$$

Exemple : l'opérateur projecteur P_Ψ sur un ket est une observable. Avec $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

si $\forall |\phi\rangle \in E$, $|\phi\rangle$ se décompose t-il sur les kets propres de P_Ψ ?

$$\forall |\phi\rangle \in E, |\phi\rangle = \mathbb{I}|\phi\rangle = (P_\Psi + \mathbb{I} - P_\Psi)|\phi\rangle = P_\Psi|\phi\rangle + (\mathbb{I} - P_\Psi)|\phi\rangle$$

Or $P_\Psi|\phi\rangle$ est ket propre de P_Ψ avec la valeur propre égale à 1

$$\implies P_\Psi(P_\Psi|\phi\rangle) = P_\Psi^2|\phi\rangle = P_\Psi|\phi\rangle$$

$(\mathbb{I} - P_\Psi)|\phi\rangle$ est ket propre de P_Ψ avec la valeur propre égale à 0

$$\implies P_\Psi[\mathbb{I} - P_\Psi]|\phi\rangle = P_\Psi|\phi\rangle - P_\Psi^2|\phi\rangle = 0|\phi\rangle$$

P_Ψ est une observable car tous les ket $|\phi\rangle$ peuvent être développé sur les kets propres de P_Ψ

c) Ensemble d'observables qui commutent

Théorème I: Si A, B deux opérateurs qui commutent et si $|\Psi\rangle$ est vecteur propre de A alors $B|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre de A, avec la même valeur propre.

Démonstration: $A|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle \implies \begin{cases} B(A|\Psi\rangle) = B(a|\Psi\rangle) = aB|\Psi\rangle \\ A(B|\Psi\rangle) = aB|\Psi\rangle \text{ par ce que } AB = BA \end{cases}$

-Si a est non dégénéré alors $B|\Psi\rangle$ est colinéaire à $|\Psi\rangle$ donc $|\Psi\rangle$ est vecteur propre de B

-Si a est dégénéré alors $\forall |\Psi\rangle \in E_a$ on a $B|\Psi\rangle \in E_a$ ce qui implique que E_a est globalement invariant (stable) sous l'action de B .

Théorème II: Si deux observables A et B commutent et si $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont des vecteurs propres de A de valeurs propres différentes alors: $\langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$

$$\left. \begin{array}{l} A|\Psi_1\rangle = a_1|\Psi_1\rangle \\ A|\Psi_2\rangle = a_2|\Psi_2\rangle \\ a_1 \neq a_2 \end{array} \right\} \implies \begin{cases} \langle \Psi_1 | AB | \Psi_2 \rangle = a_1 \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle \\ \langle \Psi_1 | BA | \Psi_2 \rangle = a_2 \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle \\ 0 = (a_1 - a_2) \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle \end{cases}$$

donc $\langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$

Théorème III: Il est possible de construire une base orthonormée de l'espace des états (E) constituée par des vecteurs propres communs à deux observables A et B qui commutent.

A est une observable, $\{|U_n^i\rangle\}$ est une base orthonormée de E formée de vecteurs propres de A : $A|U_n^i\rangle = a_n|U_n^i\rangle$ et $\langle U_n^i | U_{n'}^j \rangle = \delta_{nn'}\delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, \dots, g_n, n, n' = 1, 2, \dots$)

\implies la matrice $A = a_n \mathbb{I}$ est diagonale.

Question: Quelle est la matrice de B dans la base $\{|U_n^i\rangle\}$?

or d'après le théorème II $\langle U_n^i | B | U_{n'}^j \rangle = 0$ pour $n \neq n'$, par contre rien à dire pour $n = n'$ et $i \neq j$. La matrice de B sera donc "diagonale par blocs" où les blocs sont formés par des matrices carré ($g_n \times g_n$) d'éléments de B sur E_n : $\langle U_n^i | B | U_{n'}^j \rangle$

| | | | | |
|-------|----------|----------|----------|---|
| | E_1 | E_2 | E_3 | . |
| E_1 | M_{11} | 0 | 0 | 0 |
| E_2 | 0 | M_{22} | 0 | 0 |
| E_3 | 0 | 0 | M_{33} | 0 |
| . | 0 | 0 | 0 | . |

Remarque : si a_n est solution simple de l'équation caractéristique $\det(A - a_n \mathbb{I}) = 0$ alors la diagonale de B est formée par des matrices (1x1) c'est à dire des constantes.

Désignons par $\{|U_{n,p}^i\rangle\}$ la base de E_n commune aux vecteurs propres A et B telle que:

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

Exercice : montrer que $[A, B]|U_{n,p}^i\rangle = 0 \forall i, n, p$.

$$AB|U_{n,p}^i\rangle = b_p A|U_{n,p}^i\rangle = b_p a_n |U_{n,p}^i\rangle \text{ et } BA|U_{n,p}^i\rangle = a_n B|U_{n,p}^i\rangle = a_n b_p |U_{n,p}^i\rangle \implies [A, B]|U_{n,p}^i\rangle = 0$$

d) Ensembles complets d'observables qui commutent: ECOG

i) **Définition:** On dit que les observables A, B, \dots, L forment un ensemble complet d'observables qui commutent (ECOG) s'ils commutent deux à deux et s'il existe une et une seule base orthonormée de E formée des vecteurs propres communs à ces observables.

Conséquence: la donnée des valeurs propres a_n, b_p, \dots, l_r des observables A, B, \dots, L formant un ECOC détermine le vecteur propre unique commun à A, B, \dots, L .

On note ce ket propre commun $|a_n, b_p, \dots, l_r\rangle$. On dit alors que l'état dynamique du système physique (décrit par le ket en question) est complètement spécifié par la donnée des nombres quantiques, a_n, b_p, \dots, l_r .

ii) Soit une observable A de spectre $\{a_n\}$ avec $\{|U_n^i\rangle\}$ la base de E formée des vecteurs propres de A .

- Pour tout n , la valeur propre a_n est simple (non dégénéré) alors la donnée de a_n détermine de façon unique le vecteur propre correspondant. Ceci implique qu'il existe une base orthonormée de E formée de vecteurs propres de A . Alors A est ECOC à lui seul

- Si il existe un n pour qui a_n est dégénéré. C'est à dire, il existe dans E plusieurs bases formées de vecteurs propres de A avec a_n comme valeur propre alors A n'est pas un ECOC. soit alors B une observable tel que $[A, B]=0$. Existe-il une base orthonormée de E formée de vecteurs propres communs à A et B ? Si oui A, B forment un ECOC

- Si non, s'il existe un couple de valeurs propres (a_n, b_p) correspondant à plusieurs vecteurs propres communs à A et B indépendants alors on prend une observable C qui commute avec A et B et ainsi de suite jusqu'à trouver une base unique de E formée de vecteurs propres communs aux observables A, B, C, \dots qui formeront donc un ECOC.

6 Applications

6.1 Représentations $\{|r\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$

i) Expression d'un ket dans $\{|r\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$

Dans la représentation $\{|r\rangle\}$, les coefficients C_n du développement de $|\Psi\rangle \in E$ sont les fonctions d'ondes : $\Psi(\vec{r}) = \langle r|\Psi\rangle$

Dans la représentation $\{|p\rangle\}$, les coefficients S_n du développement de $|\Psi\rangle \in E$ sont les fonctions d'ondes transformées de Fourier de $\Psi(\vec{r})$: $\Psi(\vec{p}) = \langle p|\Psi\rangle$

Remarque : r et p représentent les ensembles d'indice continue (x, y, z) et (p_x, p_y, p_z)

ii) relation de fermeture et d'orthonormalisation

$$\langle r|r'\rangle = \delta(r - r') \quad \langle p|p'\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad \text{orthonormalisation}$$

$$\int |r\rangle \langle r'| d^3r = \mathbb{I} \quad \int |p\rangle \langle p'| d^3p = \mathbb{I} \quad \text{relation de fermeture}$$

Le développement de $|\Psi\rangle$ dans la base $|r\rangle$ s'écrit : $|\psi\rangle = \int |r\rangle \langle r|\psi\rangle d^3\vec{r}$

Dans les notations de Dirac la fonction d'onde $\Psi(\vec{r})$ peut encore être explicitée de la manière suivante

$$\psi(\vec{r}) = \langle r|\psi\rangle = \int \langle r|r'\rangle \langle r'|\psi\rangle d^3\vec{r}' = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}') \psi(\vec{r}') d^3\vec{r}'$$

6.2 Opérateurs R et P

i) Définitions:

- les opérateurs composantes X, Y, Z de l'opérateur vectoriel R (opérateur position) sont définies par:

$$\langle r|X|\psi\rangle = x\langle r|\psi\rangle, \langle r|Y|\psi\rangle = y\langle r|\psi\rangle, \langle r|Z|\psi\rangle = z\langle r|\psi\rangle$$

où x, y et z sont les 3 indices représentant $|r\rangle$.

- les opérateurs composantes P_x, P_y, P_z de l'opérateur vectoriel P (opérateur impulsion) sont définies par:

$$\langle p|P_x|\psi\rangle = p_x\langle r|\psi\rangle, \langle p|P_y|\psi\rangle = p_y\langle r|\psi\rangle, \langle p|P_z|\psi\rangle = p_z\langle r|\psi\rangle$$

où p_x, p_y et p_z sont les 3 indices représentant $|p\rangle$.

ii) Action de P dans $\{|r\rangle\}$ et action de R dans $\{|p\rangle\}$

- Action de P dans $\{|r\rangle\}$

$$\text{On a } \langle r|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \quad \text{et} \quad \delta(r-r') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} d^3p$$

$$\begin{aligned} \text{donc } \langle r|P_i|\psi\rangle &= \int \langle r|p\rangle \langle p|P_i|\psi\rangle d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} p_i \langle p|\psi\rangle d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \langle p|\psi\rangle d^3p = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3p \int \langle p|r'\rangle \langle r'|\psi\rangle d^3r' = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{\hbar}{i} d^3p \frac{\partial}{\partial r_i} \int e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} \psi(r') d^3r' = \\ &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \int \psi(r') d^3r' \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} d^3p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \int \psi(r') \delta(r-r') d^3r' = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_i} \psi(r) \end{aligned}$$

$$\langle r|P|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r})$$

- Action de R dans $\{|p\rangle\}$

$$\text{On a } \langle p|r\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \quad \text{et} \quad \delta(\vec{p}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')/\hbar} d^3r$$

$$\begin{aligned} \text{donc } \langle p|R_i|\psi\rangle &= \int \langle p|r\rangle \langle r|R_i|\psi\rangle d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} r_i \langle r|\psi\rangle d^3r = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \langle r|\psi\rangle d^3r = \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d^3r \int \langle r|p'\rangle \langle p'|\psi\rangle d^3p' = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \frac{-\hbar}{i} d^3r \frac{\partial}{\partial p_i} \int e^{-i\vec{r}\cdot(\vec{p}-\vec{p}')/\hbar} \psi(p') d^3p' = \\ &= \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i} \int \psi(p') d^3p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int e^{i\vec{r}\cdot(\vec{p}-\vec{p}')/\hbar} d^3r = \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i} \int \psi(p') \delta(p-p') d^3p' = \frac{-\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p_i} \psi(\vec{p}) \end{aligned}$$

$$\langle p|R|\psi\rangle = \frac{-\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{p})$$

iii) R et P sont hermitiques

$$\begin{aligned} \langle \phi|R_i|\psi\rangle &= \int \langle \phi|r\rangle \langle r|R_i|\psi\rangle d^3r = \int \phi^*(\vec{r}) r_i \psi(\vec{r}) d^3r = \int (\psi^*(\vec{r}) r_i \phi(\vec{r}))^* d^3r \\ &= \left(\int \langle \psi|r\rangle \langle r|R_i|\phi\rangle d^3r \right)^* = (\langle \psi|R_i|\phi\rangle)^* = \langle \phi|R_i^+|\psi\rangle \end{aligned}$$

====> $R_i=R_i^+$ donc R_i est hermitique.

de même

$$\begin{aligned} \langle \phi|P_i|\psi\rangle &= \int \langle \phi|p\rangle \langle p|P_i|\psi\rangle d^3p = \int \phi^*(\vec{p}) p_i \psi(\vec{p}) d^3p = \int (\psi^*(\vec{p}) p_i \phi(\vec{p}))^* d^3p \\ &= \left(\int \langle \psi|p\rangle \langle p|P_i|\phi\rangle d^3p \right)^* = (\langle \psi|P_i|\phi\rangle)^* = \langle \phi|P_i^+|\psi\rangle \end{aligned}$$

====> $P_i=P_i^+$ donc P_i est hermitique

- Les kets $|r\rangle$ sont les kets propres communs à X, Y, Z correspondant aux valeurs propres x, y, z (indices continus) $X|r\rangle = x|r\rangle, Y|r\rangle = y|r\rangle, Z|r\rangle = z|r\rangle$.
- En représentation $\{|p\rangle\}$ les kets $|p\rangle$ sont kets propres communs à P_x, P_y, P_z correspondant aux valeurs propres p_x, p_y, p_z (indices continus) : $P_x|p\rangle = p_x|p\rangle, P_y|p\rangle = p_y|p\rangle, P_z|p\rangle = p_z|p\rangle$.

iv) R et P sont des observables

Car $\{|r\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$ constituent des bases de E .

De plus la donnée des valeurs propres x_0, y_0, z_0 de X, Y, Z suffit pour déterminer le vecteur propre unique correspondant $|r_0\rangle$.

L'ensemble $\{X, Y, Z\}$ est un ECOC dans E . De même pour $\{P_x, P_y, P_z\}$

Chapitre III: Postulats de la Mécanique Quantique

1 Postulats de la mécanique quantique

Postulat 1 : Etat du système physique

L'état dynamique d'un système physique à un instant t donné est défini par un ket $|\Psi(t)\rangle$ de l'espace des états E (espace vectoriel: espace de Hilbert).

Postulat 2 : Grandeurs physiques mesurables

A chaque variable dynamique ou grandeur physique mesurable A est attaché un opérateur A qui est une observable de l'espace des états E

Exemples:

| <u>Grandeur physique</u> | -----> | <u>Opérateur</u> |
|-------------------------------------|--------|-----------------------------|
| position x | -----> | $X = X^+$ |
| position $r(x,y,z)$ | -----> | $R = R^+$ |
| impulsion p_x | -----> | $P_x = P_x^+$ |
| impulsion $P(p_x, p_y, p_z)$ | -----> | $P(P_x, P_y, P_z) = P^+$ |
| Energie $E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ | -----> | $H = \frac{p^2}{2m} + V(X)$ |

Postulat 3 : mesure de A

Le résultat de mesure d'une grandeur physique A ne peut être qu'une des valeurs propres de l'observable A correspondante.

Postulat 4 : Principe de décomposition spectrale: Distribution statistique des résultats de mesure

Postulat 4 : cas de spectre discret :

La probabilité pour que la grandeur physique A mesurée sur un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ prenne l'une des valeurs propres a_n , de dégénérescence g_n de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|C_n^i|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

avec $C_n^i = \langle U_n^i | \psi \rangle$ on a

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{\langle \psi | U_n^i \rangle \langle U_n^i | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | \sum_{i=1}^{g_n} |U_n^i\rangle \langle U_n^i| \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |U_n^i\rangle \langle U_n^i| \quad \text{est le projecteur sur } E_n$$

$\{|U_n^i\rangle\}$: l'ensemble des vecteurs propres associés à a_n est une base orthonormée de E_n

Postulat. 4: cas de spectre continue

La probabilité pour que la grandeur physique A mesurée sur un système dans l'état

$|\Psi(t)\rangle$ prenne une valeur du spectre continue comprise entre $a(\alpha)$ et $a(\alpha + d\alpha)$ est :

$$dP(\alpha) = \sum_{i=1}^{g_n} \frac{|C^i(\alpha)|}{\langle \psi | \psi \rangle} d\alpha$$

Avec $C^i(\alpha) = \langle \omega^i(\alpha) | \psi \rangle$

$|C^i(\alpha)|^2 = |\langle \omega^i(\alpha) | \psi \rangle|^2$ est la densité de probabilité,

$\{|\omega^i(\alpha)\rangle\}$ est l'ensemble des vecteurs propres de A associés à $a(\alpha)$

Remarques

- La probabilité totale: $\sum_n P(a_n) + \int dP(\alpha) = 1$.

On divise par $\langle \Psi | \Psi \rangle$ si $|\Psi\rangle$ n'est pas normée

- $|\Psi\rangle$ et $e^{i\theta}|\Psi\rangle$ décrivent le même système physique.

Conséquences

i. Valeur moyenne d'une observable A

Définition: La valeur moyenne de la grandeur physique A , notée $\langle A \rangle$, où A est une observable, est la moyenne des résultats d'un grand nombre de mesures de A sur différents systèmes tous dans l'état $|\Psi\rangle$

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$\langle A \rangle$ donne un ordre de grandeur (valeur moyenne) de A mais ne donne aucune idée sur la distribution statistique des résultats de mesures autour de $\langle A \rangle$.

ii. Ecart quadratique moyen. Mesure de fluctuation de la dispersion des résultats

Définition: la quantité $(\Delta A)^2$ s'appelle écart quadratique moyen. Elle est définie par: $(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$

$(\Delta A)^2$ mesure les fluctuations des résultats de mesure autour de la valeur moyenne $\langle A \rangle$.

iii. Les relations d'incertitude de Heisenberg

Soient deux observables quelconque A et B tel que: $[A, B] = i\hbar$ alors

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2}$$

Démonstration: $\Delta A = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2}$ et $\Delta B = (\langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2)^{1/2}$

Soient $\tilde{A} = A - \langle A \rangle$ et $\tilde{B} = B - \langle B \rangle$ des observables, il est évident que $[\tilde{A}, \tilde{B}] = i\hbar$

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{A} &= (\langle \tilde{A}^2 \rangle - \langle \tilde{A} \rangle^2)^{1/2} = [\langle (A - \langle A \rangle)(A - \langle A \rangle) \rangle - \langle A - \langle A \rangle \rangle \langle A - \langle A \rangle \rangle]^{1/2} \\ &= [\langle (A - \langle A \rangle)(A - \langle A \rangle) \rangle - 0]^{1/2} = (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)^{1/2} = \Delta A \end{aligned}$$

Donc on a $\Delta\tilde{A} = \Delta A = (\langle\tilde{A}^2\rangle)^{1/2}$ et $\Delta\tilde{B} = \Delta B = (\langle\tilde{B}^2\rangle)^{1/2}$

L'inégalité de Schwartz est définie tel que:

$$\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in E: \Rightarrow |\langle\phi|\psi\rangle| \leq \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle}$$

Soit $|U\rangle$ le ket normalisé représentant l'état dynamique du système. L'inégalité de Schwartz appliqué aux kets $\tilde{A}|U\rangle$ et $\tilde{B}|U\rangle$ donne:

$$(\Delta A^2)(\Delta B^2) = (\Delta\tilde{A})^2(\Delta\tilde{B})^2 = \langle U|\tilde{A}^2|U\rangle\langle U|\tilde{B}^2|U\rangle \geq |\langle U|\tilde{A}\tilde{B}|U\rangle|^2$$

Remarque: \tilde{A} et \tilde{B} sont hermétiques mais le produit $\tilde{A}\tilde{B}$ n'est pas nécessairement hermétique.

$$\tilde{A}\tilde{B} = \frac{1}{2}[\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}] + \frac{1}{2}[\tilde{A}, \tilde{B}]$$

$$\implies \text{Generalisation } \langle U|\tilde{A}\tilde{B}|U\rangle = \langle \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} \rangle + \frac{i\hbar}{2}$$

$$\implies (\Delta A^2)(\Delta B^2) \geq \langle \frac{\tilde{A}\tilde{B} + \tilde{B}\tilde{A}}{2} \rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4} \text{ et donc la fonction } \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation appliquée aux différents composantes des observables de position R et d'impulsion P donne les relations d'incertitude Position -Impulsion de Heisenberg:

$$\Delta X \cdot \Delta P_X \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta Y \cdot \Delta P_Y \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta Z \cdot \Delta P_Z \geq \frac{\hbar}{2}$$

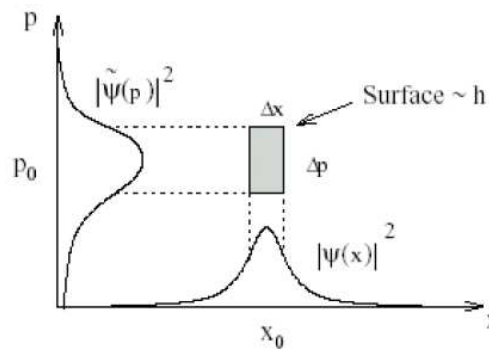


Figure. III.1. distribution de probabilité $|\psi(x)|^2$ et $|\psi(p)|^2$ pour le paquet d'onde.

La relation $\Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$ montre que le paquet d'onde « occupe une surface $\approx \hbar$ dans l'espace des phase.

iv. Compatibilité des observables

Soient deux observables A et B qui commutent ($[A, B]=0$), il existe donc un ensemble de vecteurs propres $\{|U_{n,p}\rangle\}$ commun à A et B qui constitue une base orthonormée de E. Physiquement, ceci veut dire que les variables dynamiques représentées par ces deux observables peuvent être définies de façon précise simultanément: Ce sont des variables compatibles. Dans le cas contraire elles sont incompatibles.

Remarque: si le couple {A, B} est un ECOC, alors l'état du système est déterminé de façon unique par le résultat de la mesure obtenue $|a_n, b_p\rangle$. On dit alors que le système est préparé dans un état quantique déterminé (analogie avec le problème d'une polarisation de l'optique dans une direction par un polariseur).

v. Etat du système juste après une mesure.

Soit $|\psi\rangle = \sum_n C_n |U_n\rangle$ tel que la mesure de A donne la valeur propre a_n . L'état du système juste après la mesure, $|\phi\rangle$, est donné par la relation suivante:

$$|\phi\rangle = \frac{P_n}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}} \quad \text{avec} \quad P_n = \sum_i |U_n^i\rangle\langle U_n^i| \quad \text{le projecteur sur } E_n$$

2 Evolution du système dans le temps.

Postulat 5: L'équation de Schrödinger régit l'évolution dans le temps du ket d'état $|\psi\rangle$

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

$H(t)$ est l'observable associée à l'énergie totale du système. On l'appelle opérateur Hamiltonien du système.

Conséquences

a) Opérateur d'évolution. $U(t;t_0)$

Soit $|\psi(t_0)\rangle$ le vecteur état du système à un instant t_0 donné. Connaissant $|\psi(t_0)\rangle$

l'opérateur $U(t,t_0)$ permet de donner $|\psi(t)\rangle \forall t$ tel que: $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle$

Propriétés :

i. $U(t_0, t_0) = 1$

On a $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle$ si $t=t_0$ alors $|\psi(t_0)\rangle = U(t_0,t_0) |\psi(t_0)\rangle$

====> $U(t_0,t_0)=1$

ii. $U(t, t_0) = U(t, t_1) \cdot U(t_1, t_0)$

En effet $|\psi(t_1)\rangle = U(t_1,t_0) |\psi(t_0)\rangle$ et $|\psi(t)\rangle = U(t,t_1) |\psi(t_1)\rangle$

=====> $|\psi(t)\rangle = U(t,t_1) U(t_1,t_0) |\psi(t_0)\rangle$

Or $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle$ donc on a $U(t,t_0) = U(t,t_1) U(t_1,t_0)$

iii. $U(t, t') \cdot U(t', t) = 1$ évidente

iv. $U^+(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0)$

Soient deux états normés: $\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle=1$ et $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1$ tel que

$|\psi(t)\rangle = U(t,t_0) |\psi(t_0)\rangle$

=====> $\langle\psi(t)| = \langle\psi(t_0)| U^+(t,t_0)$

=====> $1 = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|U^+(t,t_0)|\psi(t)\rangle$

$= \langle\psi(t_0)|U^+(t,t_0)U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

$= \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$

=====> est unitaire $U^+(t,t_0)U(t,t_0)=1$ ====> $U^+(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0)$

=====> $U(t,t_0)$ est unitaire

Règle une matrice A est unitaire si $A^+=A^{-1}$

v. Equation de Schrödinger

On a $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$ Or $|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$ donc on obtient

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle = H(t) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$$

$$\Rightarrow \left(i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) - H(t) U(t, t_0) \right) |\psi(t_0)\rangle = 0 \Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0)$$

vi. Intégration:

Si H dépend de t (H=H(t))

$$\Rightarrow i\hbar \frac{d}{dt'} U(t', t_0) = H(t') U(t', t_0) \Rightarrow i\hbar dU(t', t_0) = H(t') U(t', t_0) dt'$$

$$\Rightarrow i\hbar \int_{t_0}^t dU(t', t_0) = \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt' \Rightarrow i\hbar [U(t', t_0)]_{t_0}^t = \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'$$

$$\Rightarrow U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'$$

Si H ne dépend pas de t alors

$$i\hbar dU(t', t_0) = HU(t', t_0) dt' \Rightarrow \frac{dU(t', t_0)}{U(t', t_0)} = \frac{H}{i\hbar} dt' \Rightarrow [\ln U(t', t_0)]_{t_0}^t = -\frac{iH}{\hbar} \int_{t_0}^t dt'$$

$$\Rightarrow \ln U(t, t_0) = -\frac{iH}{\hbar} (t - t_0) \Rightarrow U(t, t_0) = e^{-\frac{iH}{\hbar} (t-t_0)}$$

Remarque :

$$U^+(t, t_0) = e^{\frac{iH}{\hbar} (t-t_0)} = U(t_0, t)$$

Développons $|\psi(t_0)\rangle$ dans la base des vecteurs propres de H à savoir $|\varphi_n\rangle$ tels que :

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \text{ avec } \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \text{ et } \sum |\varphi_n\rangle \langle \varphi_m| = 1$$

$$\text{On a } e^{\alpha H} = 1 + \alpha H + \frac{\alpha^2}{2} H^2 + \frac{\alpha^3}{3!} H^3 + \dots$$

$$e^{\alpha H} |\varphi_n\rangle = \left(1 + \alpha H + \frac{\alpha^2}{2} H^2 + \frac{\alpha^3}{3!} H^3 + \dots \right) |\varphi_n\rangle$$

$$= \left(1 + \alpha E_n + \frac{\alpha^2}{2} E_n^2 + \frac{\alpha^3}{3!} E_n^3 + \dots \right) |\varphi_n\rangle = e^{\alpha E_n} |\varphi_n\rangle$$

Or $|\psi(t_0)\rangle = \sum_n C_n(t_0) |\varphi_n\rangle$ alors

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle = e^{-\frac{iH}{\hbar} (t-t_0)} |\Psi(t_0)\rangle \\ &= \sum_n C_n(t_0) e^{-\frac{iH}{\hbar} (t-t_0)} |\varphi_n\rangle = \sum_n C_n(t_0) e^{-\frac{iE_n}{\hbar} (t-t_0)} |\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

b) Equation d'évolution des valeurs moyennes et relation d'incertitude temps-énergie.

Soit $|\Psi\rangle$, le vecteur état du système normé, Calculons l'évolution de la valeur moyenne,

$\langle A \rangle$, dans le temps:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi | A | \psi \rangle \text{ avec } \langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Écrivons l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \Rightarrow -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | H(t)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle &= \frac{\partial}{\partial t} (\langle \psi | A | \psi \rangle) + \langle \psi | A \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} (A) | \psi \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | HA | \psi \rangle + \frac{-i}{\hbar} \langle \psi | AH | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} (A) | \psi \rangle \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle}$$

i) cas particulier: constante du mouvement

Définition: si l'observable A représente une variable dynamique ne dépendant pas explicitement du temps ($\frac{\partial A}{\partial t} = 0$) et si A commute avec l'Hamiltonien H du système

([A;H]=0) alors A est dite constante du mouvement c'est à dire: $\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0$.

Remarque: si [A;H] = 0 alors il existe un ensemble $\{|U_{n,p}\rangle\}$ de E formé de vecteurs propres communs à H et A: $A|U_{n,p}\rangle = a_p |U_{n,p}\rangle$ et $H|U_{n,p}\rangle = E_n |U_{n,p}\rangle$

si H ne dépend pas explicitement du temps alors $|U_{n,p}\rangle$ est stationnaire

=> E_n est indépendante du temps. Donc si à l'instant t initial le système se trouve dans un état $|U_{n,p}\rangle$ de H il y restera indéfiniment.

ii) Exemple d'application: Théorème d'Ehrenfest, cas des observables R et P.

Pour une particule soumise au potentiel $V(\vec{r})$ l'Hamiltonien est: $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle R \rangle &= \frac{1}{m} \langle P \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle &= -\langle \vec{\nabla} V(\vec{r}) \rangle \end{aligned} \right\} \text{Théorème d'Ehrenfest}$$

Ces équations ont une forme semblable aux équations classiques de Hamilton Jacob.

Théorème d'Ehrenfest: Les équations de la mécanique classique sont valables en valeur moyenne en mécanique quantique.

iii) Relation d'incertitude Temps-Energie

Soit un système conservatif d'Hamiltonien H ne dépendant pas du temps. Soit $|\Psi\rangle$ un ket décrivant à l'instant t; l'état de ce système. Soit A une observable ne dépendant pas explicitement du temps.

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

L'inégalité de Schwartz donne

$$\boxed{\Delta A \Delta E \geq \frac{1}{2} |\langle [A, H] \rangle|}$$

Chapitre IV : Etude de Quelques Systèmes Quantiques Simples

Nous allons nous intéresser à une particule plongée dans un potentiel $V(\vec{r})$ indépendant du temps. C'est à dire tel que $\frac{\partial V(\vec{r})}{\partial t} = 0$. La fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ d'une telle particule vérifie l'équation générale de Schrödinger:

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

avec $\psi(\vec{r}, t) = \langle \mathbf{x} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle = \psi(\mathbf{x}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$

1 L'équation générale de Schrödinger

La mécanique quantique repose sur l'équation de Schrödinger qui s'écrit à une dimension :

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

Question : Comment résoudre l'équation de Schrödinger ? Supposons que la fonction d'onde puisse se séparer en deux fonctions dont elle est le produit:

$$\psi(x, t) = f(t) \cdot \psi(x)$$

- En remplaçant $\psi(x, t)$ par le produit $f(t) \cdot \psi(x)$ dans l'équation de Schrödinger, on obtient :
- $-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \cdot \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)$ [$V(x)$ est une énergie potentielle]
- Le terme de gauche ne dépend que de t ; celui de droite ne dépend que de x
- Puisqu'ils sont égaux, ils sont nécessairement égaux à une constante qui a la dimension d'une énergie.

Le membre de gauche ne dépend que du temps

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{1}{f(t)} \frac{\partial f(t)}{\partial t} = E \implies \ln(f(t)) = \frac{-iEt}{\hbar} + C$$

$$\text{Donc } f(t) = e^C e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Le membre de droite ne dépend que de x : $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0$$

- C'est l'équation de Schrödinger indépendante du temps

En résumé $\psi(x, t) = A e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi(x)$ et $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

- La constante A est quelconque et peut, pour le moment, être ignorée. En fait A sera explicitée plus tard lors de l'utilisation de la condition de normalisation appliquée à la particule

2 Potentiel carre unidimensionnel

Le problème le plus simple qu'on puisse voir est celui où le potentiel $V(r)$ subit des discontinuités tout en restant constant entre deux discontinuités. En réalité $V(r)$ n'est pas discontinu mais varie très rapidement au voisinage de certaines valeurs de r . Lorsque les intervalles, sur lesquels se fait cette variation, sont très petits devant les longueurs caractéristiques du problème, à savoir, on peut remplacer le potentiel réel par le potentiel carré. Cette approximation n'est plus valable pour des longueurs d'ondes très petites (c. a. d. énergies très grandes).

La résolution de l'équation de Schrödinger pour de tels problèmes est analogue à la résolution de l'équation de propagation des ondes lumineuses en optique.

2.1 Analogie avec l'optique

Soit un milieu transparent d'indice n ne dépendant ni des coordonnées d'espace ni du temps. Dans ce milieu se propage des ondes électromagnétiques dont les champs électrique ne dépendent que de la coordonnée x (indépendant des coordonnées y et z). L'équation de propagation du champ électrique $E(x,t)$ dans ce milieu s'écrit:

$$\left[\frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] E(x, t) = 0 \quad (\text{ox: direction de propagation})$$

Cette équation admet une solution stationnaire de la forme: $\vec{E}(x, t) = \vec{e}E(x)e^{-i\omega t}$

(\vec{e} est un vecteur unitaire). En reportant solution dans l'équation de propagation on trouve: $\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{n^2\omega^2}{c^2} \right] E(x) = 0$

On voit que cette relation a la même forme que celle obtenue pour une particule dans un potentiel carré $\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \right] \psi(x) = 0$.

On peut donc faire correspondre au problème de mécanique quantique relatif au potentiel carré, un problème d'optique ondulatoire, celui de la propagation d'une onde électromagnétique de pulsation ω , dans un milieu dont l'indice n subit des discontinuités du type de celle que subit $V(x)$. La relation liant les paramètres optiques aux paramètres mécaniques est alors:

$$\frac{n^2\omega^2}{c^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \quad \Rightarrow \quad n = \frac{c}{\omega} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))}$$

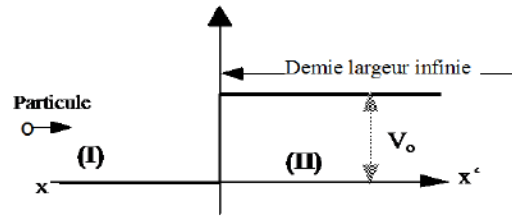
- Si $E > V$ alors l'indice n est réel et l'onde électromagnétique est de la forme e^{-ikx} , le milieu est transparent
- Si $E < V$ alors l'indice n est imaginaire pure et l'onde lumineuse est de la forme e^{-kx} , c'est une onde lumineuse qui s'amortit lorsque x augmente. On dit que l'onde évanescence. Le milieu est absorbant.

2.2 Réflexion et transmission par une barrière de potentiel

Il s'agit d'étudier le mouvement à une dimension d'une particule soumise à un potentiel présentant la forme simple suivante :

$$V(x) = 0 \quad \text{si } x < 0 \quad \text{région I}$$

$$V(x) = V_0 \quad \text{si } x > 0 \quad \text{région II}$$



$V(x)$ est constant dans les deux régions de l'espace. Elle présente un saut à $x=0$. Supposons que la particule vient de x vers x' : Le problème est d'étudier la possibilité de passage de la particule de (I) vers (II)

► En mécanique classique

Le passage de la particule de la région I à la région II est impossible si l'énergie E est inférieure à V_0 .

► En mécanique Quantique

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger et étudier les états stationnaires, états propres de l'hamiltonien H :

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

Il y a deux régions (2 zones)

- Région (I) $x < 0; V=0$ $\ddot{\psi}_1(x) + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1(x) = 0$

Posons $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ vecteur d'onde de la région (I): $\ddot{\psi}_1(x) + k_1^2\psi_1(x) = 0$

Solution : $\psi_1(x) = A_1e^{ik_1x} + B_1e^{-ik_1x}$

$A_1e^{ik_1x}$ est la partie incidente ;

$B_1e^{-ik_1x}$ est la partie réfléchiée car elle a la forme d'une onde qui se propage dans le même milieu caractérisé par le même vecteur d'onde k_1 que l'onde incidente

- Région(II) $x > 0; V=V_0$ $\ddot{\psi}_2(x) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V_0]\psi_2(x) = 0$

a. Si l'énergie de la particule est supérieure ou égale à celle de la marche ($E \geq V_0$)

Posons $k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$ vecteur d'onde de la région (II)

$\ddot{\psi}_2(x) + k_2^2\psi_2(x) = 0$ et la solution est : $\psi_2(x) = A_2e^{ik_2x} + B_2e^{-ik_2x}$

$A_2e^{ik_2x}$ L'onde se propage dans le même sens que l'onde incidente; c'est une onde transmise

$B_2e^{-ik_2x}$ n'est pas physique car il ne peut y avoir de réflexion dans la région II. Cette solution est à rejeter (elle n'a pas de signification) donc $B_2 = 0$

On a alors $\psi_2(x) = A_2e^{ik_2x}$ onde transmise

Les intensités d'onde incidente $|A_1|^2$, réfléchies $|B_1|^2$ et transmise $|A_2|^2$ sont déterminées en considérant l'hypothèse:

i: la continuité de la fonction d'onde de la région (I) à (II)

ii: la continuité de la première dérivée de ψ : $\dot{\psi}$

Si on écrit la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$, on obtient:

- $\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A_1 + B_1 = A_2$
- $\dot{\psi}_1(0) = \dot{\psi}_2(0) \Rightarrow ik_1A_1 - ik_1B_1 = ik_2A_2$

Des deux équations de continuité on obtient:

$$\frac{A_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \quad \text{et} \quad \frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}$$

D'où les coefficients de réflexion R et de transmission T qui sont définis :

$$R = \frac{\text{Intensité de l onde réfléchie}}{\text{Intensité de l onde incidente}} = \frac{|B_1|^2}{|A_1|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2, \quad T = \frac{\text{Intensité de l onde transmise}}{\text{Intensité de l onde incidente}} = \frac{|A_2|^2 k_2}{|A_1|^2 k_1} = \frac{4k_2 k_1}{(k_1 + k_2)^2}$$

Remarque: le rapport $\frac{k_2}{k_1}$ est dû au fait que les ondes incidente et transmise se propagent dans des milieux d'indices différents.

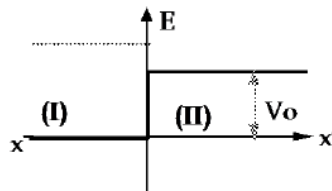
$R + T = 1$ analogie avec l'optique

R et T sont interprétés comme des probabilités de réflexion et de transmission de la particule par la barrière de potentiel. Par ailleurs

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \quad R = \frac{[\sqrt{2mE} - \sqrt{2m(E - V_0)}]^2}{[\sqrt{2mE} + \sqrt{2m(E - V_0)}]^2} = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}\right)^2$$

$$T = 1 - R = \frac{4\sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{\left[1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}\right]^2} \text{ ce qui permet l'interprétation de R et T.}$$

► Si $E > V_0$



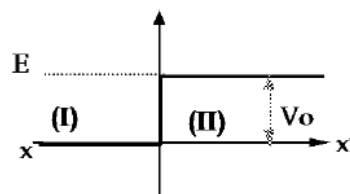
En mécanique quantique: la probabilité de réflexion est faible mais non nulle (réflexion partielle).

En mécanique classique il n'y a pas de réflexion car $R=0$

Les deux résultats sont différents.

Exemple: si $E = 2V_0$ alors $R_{MQ}=0.029 \approx 3\%$ et $R_{MC}=0$

► Si $E = V_0$



En mécanique quantique: la réflexion est totale $R=1$,

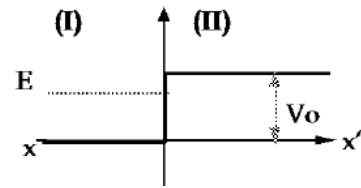
En mécanique classique: la particule passera vers la région (II) (juste au dessus de la hauteur) mais avec une énergie cinétique plus

b. Si l'énergie de la particule est inférieure à l'énergie de la marche $0 < E < V$

En mécanique classique: la particule rebondit sur la marche et repart dans l'autre sens, la réflexion est totale $R=1$,

En mécanique quantique: L'équation de Schrödinger s'écrit, quelque soit la région:

$$\text{Soit } \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0$$



On introduit alors les constantes $k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\rho_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

Et la solution s'écrit: $\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x}$ et $\psi_2(x) = A'_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x}$

Le coefficient A_1 traduit l'existence d'ondes se propageant dans le sens des x croissants, le coefficient B_2 traduit l'existence d'une onde réfléchie dans la zone 1, et comme il faut que la fonction d'onde reste bornée à l'infini, on doit prendre $A'_2 = 0$.

Si on écrit la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = 0$, on obtient:

$$A_1 + B_1 = A'_2 \quad \text{et} \quad ik_1 A_1 - ik_1 B_1 = \rho_2 B'_2$$

$$\text{On obtient alors } \frac{B'_2}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} \quad \text{et} \quad \frac{B_1}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2}$$

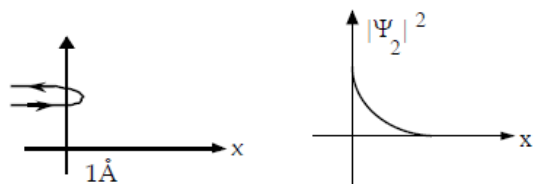
On définit alors un coefficient de réflexion $R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = 1$. Comme en mécanique classique, la particule est totalement réfléchie. Cependant, il subsiste une différence fondamentale. Du fait de l'existence de l'onde évanescence $e^{-\rho_2 x}$, la particule a une probabilité de présence non nulle dans la région de l'espace qui classiquement, lui est interdite. Cette probabilité décroît exponentiellement en x et devient négligeable à une épaisseur caractéristique $\frac{1}{\rho_2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m(E-V_0)}}$, et on remarque que, conformément à l'intuition, cette épaisseur devient nulle dans le cas classique ($\hbar = 0$) et qu'elle devient infinie lorsque $E \rightarrow V_0$, où on rejoint également le cas classique. C'est cette probabilité de présence et sa longueur caractéristique qui vont expliquer physiquement l'effet tunnel.

En mécanique quantique, la probabilité de présence de la particule dans la région II est : $|\psi_2(x)|^2 = |B'_2|^2 e^{-2\rho_2 x}$.

Elle décroît exponentiellement avec x mais elle est non nulle (elle s'annule rapidement avec x)

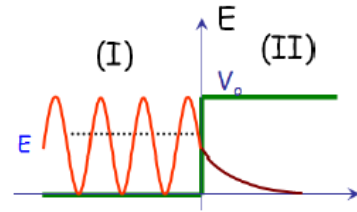
Exemple: $V_0 - E = 1 \text{ eV}$, $x = 1 \text{ \AA}$

$$\frac{2(2m(V_0 - E))^{1/2}}{\hbar} = 1,045, \quad e^{-1,045} = 0,29$$



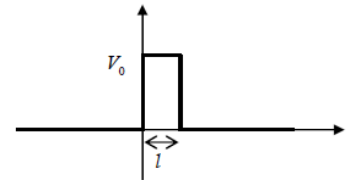
Remarque:

si la largeur de la barrière de potentiel est faible (de l'ordre de 1\AA) la particule passe par effet tunnel. La particule traverse la barrière sans perte d'énergie. Dans le cas d'une barrière de potentiel infiniment élevée $V_0 \rightarrow \infty$ alors $k \rightarrow \infty$ et par suite, $\Psi_2(x) \rightarrow 0$



c. Effet tunnel:

On considère à présent une barrière de potentiel, toujours de hauteur V_0 et d'épaisseur l . Nous nous limiterons toujours au cas où $0 < E < V_0$, cas où la physique classique interdit à la particule de franchir la barrière.



Dans ce cas, il y a probabilité de transmission non nulle, contrairement aux prévisions classiques.

En effet, au regard des résultats sur la marche de potentiel (qui est ce qu'une particule venant de $-\infty$ voit en premier lieu), on voit qu'il suffit que la longueur l soit inférieure à ρ_B^{-1} pour que la zone où la densité de probabilité prend des valeurs notables s'étendent jusqu'à l'autre extrémité de la barrière et qu'elle s'étende alors jusqu'à l'infini.

Il s'agit en fait d'un phénomène analogue au phénomène de réflexion totale frustrée dans le cas de la réflexion d'une onde électromagnétique sur une feuille métallique d'épaisseur inférieure à l'épaisseur de peau déjà rencontrée en électromagnétisme.

Cet argument mérite tout de même d'être précisé. Ecrivons alors les solutions de l'équation de Schrödinger aux états stationnaires. On trouve immédiatement:

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x}$$

$$\psi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x} \quad \text{toujours avec } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\psi_2(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x}$$

Ici on ne peut pas annuler à priori B_2 , puisque une réflexion en $x=l$ est possible, mais par contre, en considérant qu'il n'y a pas de dispositif réflecteur à l'infini, on peut écrire $A'_3 = 0$. Les conditions de raccordement en $x=0$ et en $x=l$ donnent les coefficients en fonction par exemple de A_3 , et on en tire les coefficients de réflexion et de transmission pour la barrière:

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1^2 + \rho_2^2)^2 \sinh^2 \rho_2 l}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \sinh^2 \rho_2 l} = \frac{V_0^2 \sinh^2 \rho_2 l}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \rho_2 l}$$

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 \rho_2^2}{4k_1^2 \rho_2^2 + (k_1^2 + \rho_2^2)^2 \sinh^2 \rho_2 l} = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \rho_2 l}$$

Dans le cas d'une barrière épaisse, on a $\rho_2 l \gg 1$.

On a à ce moment là $\sinh^2 \rho_2 l = \frac{e^{2\rho_2 l}}{4}$ et $4E(V_0 - E) \ll V_0^2 \sinh^2 \rho_2 l$.

Le coefficient de transmission s'écrit alors: $T = \frac{16E(V_0-E)}{(V_0)^2} e^{-2\rho_2 l}$

On voit alors que la probabilité décroît de manière exponentielle lorsque l augmente ou que $(\rho_2)^{-1}$ diminue.

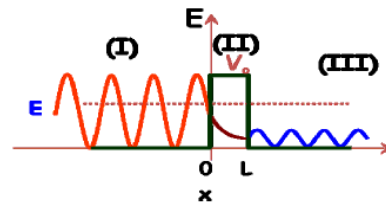
On peut alors donner quelques ordres de grandeur:

- considérons un électron d'énergie 1eV et une barrière d'énergie 2eV et de largeur 1Å. La longueur caractéristique de pénétration vaut alors 1,96 Å. La formule donne alors $T= 0,78$, ce qui indique que l'électron a 80% de chances de franchir la barrière par effet tunnel.

- Pour un proton, de masse 1840 fois plus grande, la longueur de pénétration vaut $4,56 \cdot 10^{-2}$ Å, ce qui signifie qu'avec la même barrière le proton a beaucoup moins de chance de passer. En effet ici $T=4 \cdot 10^{-19}$.

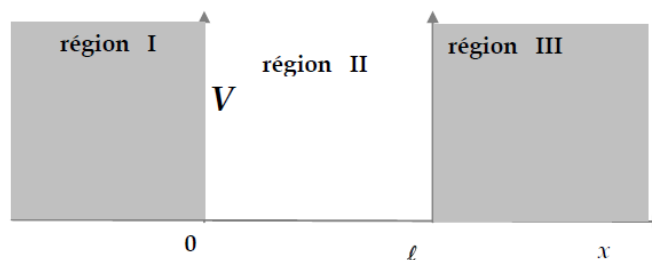
- Enfin, au niveau macroscopique on peut se demander quelle est la probabilité pour qu'un cycliste de 70kg arrivant à 36km/h sur une colline abrupte de 20m de haut et 50m de large. On a alors $V_0 = mgz = 14kJ$ et $E = 3,5kJ$. La longueur de pénétration du paquet d'onde associé au cycliste vaut alors $8,2 \cdot 10^{-38}m$ et donc le coefficient de transmission vaut : $e^{-\rho_2 l} = e^{-6 \cdot 10^{38}} \ll 1$.

La petitesse de la constante de Planck rend cet effet inexistant au niveau microscopique. On ne doit donc pas essayer de traverser un mur par effet tunnel!



2.3 Particule dans la boîte unidimensionnelle

$$V_I = \infty, \quad V_{II} = 0 \quad \text{et} \quad V_{III} = \infty$$



La Solution de l'Equation de Schrödinger est:

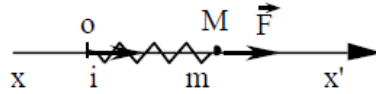
- Fonction d'onde : $\psi_{II} = \sqrt{2/l} \cdot \sin(n\pi x/l)$
- Energie : $E_{II} = (nh)^2/(8ml^2)$ avec $n = 1, 2, 3, \text{etc.}$
- Ψ_I et Ψ_{III} sont nulles dans les régions I et III

3 Potentiel parabolique: problème de l'oscillateur harmonique unidimensionnel

Le problème de l'oscillateur harmonique est très important en physique, d'abord par ce qu'on peut résoudre rigoureusement l'équation de Schrödinger correspondante et puis par ce que plusieurs problèmes physiques (vibration atomique cristalline, champ électrique,...) se ramènent à celui d'un oscillateur harmonique.

3.1 Traitement classique.

L'oscillateur harmonique classique est réalisée, par exemple, par le mouvement d'un point matériel M de masse m_0 le long d'un axe (xox') et soumis à une force de rappel \vec{F} dérivant d'un potentiel $U(x) = -\frac{kx^2}{2}$



On représente le problème par un ressort de raideur k portant à sa tête le point M de masse m .

L'énergie potentielle $V(x)$ est : $V(x) = -U(x) = \frac{kx^2}{2}$

La force de rappel \vec{F} dérivant du potentiel est

$$F = \frac{dU(x)}{dx} = -kx \Rightarrow \vec{F} = -kx\vec{i}$$

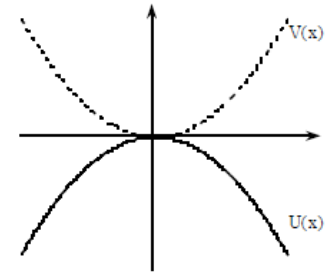
Equation de mouvement:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \rightarrow \ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0 \text{ soit } \ddot{x} + \omega^2x = 0 \text{ avec } \omega^2 = \frac{k}{m}$$

La solution est: $x = x_0 \sin(\omega t + \phi)$

Energie cinétique : $T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2 \cos^2(\omega t + \phi)$

Energie Totale $E_{Tot} = T + V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x_0^2$



3.2 Traitement quantique

En mécanique quantique, le problème correspondant est celui d'une particule de masse m à une dimension, d'Hamiltonien H tel que:

$$H = \frac{1}{2m}(P^2 + m\omega^2 X^2) \quad [P, X] = i\hbar$$

a) Problème des valeurs propres

Considérons les opérateurs sans dimension : \tilde{P}, \tilde{X} et \tilde{H} tel que $P = \sqrt{m\hbar\omega}\tilde{P}$, $X = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\tilde{X}$ et $H = \hbar\omega\tilde{H}$

$$\Rightarrow [\tilde{P}, \tilde{X}] = -i \quad \text{et} \quad \tilde{H} = \frac{1}{2}(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2)$$

b) Opérateur d'annihilation a et de création a^+ du nombre de particules N :

Pour factoriser \tilde{H} on considère les opérateurs a et a^+ tel que:

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

Les opérateurs a et a^+ sont non hermitiques mais adjoints l'un de l'autre

$$[a, a^+] = 1 \quad \text{et} \quad aa^+ = \frac{1}{2}(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2) + \frac{1}{2}$$

de même $a^+a = \frac{1}{2}(\tilde{X}^2 + \tilde{P}^2) - \frac{1}{2}$

Posons $N = a^+a$ opérateur nombre de particules

- $\tilde{H} = N + \frac{1}{2}$ Les vecteurs propres de \tilde{H} sont vecteurs propres de N et vice versa

- $[N, a] = -a, [N, a^+] = a^+$

c) Vecteurs propres et valeurs propres de N :

Soit $|\phi_n\rangle$ le vecteur propre de N avec la valeur propre n ; on a alors $N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$

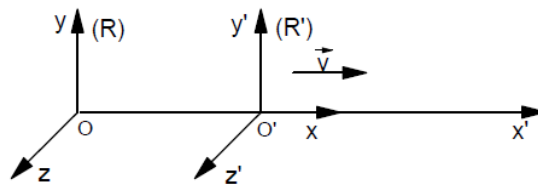
$$\Rightarrow H|\phi_n\rangle = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)|\phi_n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \Rightarrow \boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)}$$

Chapitre V : Notions de relativité restreinte

1 Insuffisances de la mécanique de Galilée - Newton

1.1 Transformation de Galilée

Soient R et R' deux référentiels galiléens, R' étant animé d'une vitesse uniforme \vec{V} par rapport à R. On peut toujours choisir les axes de R et R' de façon que $Ox // O'x' // v_r$; $Oy // O'y'$; $Oz // O'z'$ et que pour $t=t'=0$ les origines O et O' coïncident.



$$\text{transformation de Galilée : } \begin{cases} x' = x - vt \\ y' = y, z' = z, t' = t \end{cases}$$

$t' = t \rightarrow$ temps absolu

$$\rightarrow \text{transformation des vitesses : } \frac{dx'}{dt'} = \frac{dx - v dt}{dt} = \frac{dx}{dt} - v \quad (\vec{V}_r = \vec{V}_a - \vec{V}_e)$$

1.2 Insuffisances de la transformation de Galilée et principe de relativité restreinte

Le **principe de relativité restreinte** s'énonce de la façon suivante :

"Les lois de la physique sont invariantes vis à vis des translations et rotations des systèmes d'axe, des translations dans le temps, des symétries planes dans l'espace et **des changements de référentiels Galiléens**".

Or on constate facilement que les lois de l'électromagnétisme ne satisfont pas ce principe lorsqu'on utilise la transformation de Galilée.

- Equations de Maxwell $\rightarrow c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$ (non infinie !)

- ϵ_0 et μ_0 identiques dans tout référentiel $\Rightarrow c$ est indépendante du référentiel

- transformation de Galilée $\rightarrow c' = c - v \neq c$ dans un référentiel en mouvement.

Par ailleurs, toutes les expériences entreprises montrent que c est effectivement indépendante du référentiel galiléen utilisé (Michelson et Morley, ...).

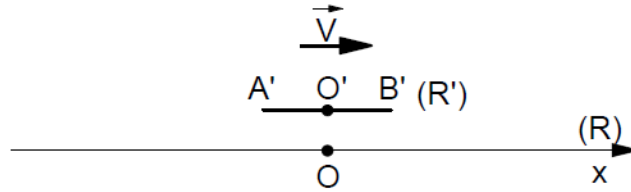
1.3 Postulats de la relativité restreinte (Einstein, 1905)

- principe de relativité restreinte (voir plus haut)

- **invariance de C**

- validité de la mécanique newtonienne pour $v \ll c$

1.4 Conséquences sur les notions de temps et de distance



Soit une barre $A'B'$ de longueur l' dans R' , O' étant milieu de $A'B'$, et supposons qu'à $t = t' = 0$ (O et O' sont confondus), O et O' voient deux signaux lumineux issus de A' et B' arriver **simultanément**.

- puisque O' est milieu de $A'B'$ et que la lumière se propage à la vitesse c , O' peut conclure que les signaux émis à partir de A' et B' l'ont été simultanément (à un instant antérieur $\Delta t = \frac{l'}{2c}$)
- par contre, dans R , compte tenu de la nature finie et constante de c , au moment de l'émission des signaux, **B' était plus proche de O que A'** (la règle s'est déplacée dans R entre l'instant d'émission et celui de perception par O) : autrement dit, pour que les signaux soient arrivés simultanément en O , il a fallu que B' (plus proche) ait émis un signal après A'

⇒ Deux événements simultanés dans R' ne le sont pas dans R

⇒ **Abandon de la notion de temps absolu**

Supposons maintenant que O veuille mesurer $A'B' = l'$. Pour cela, il faut projeter

simultanément A' et B' de R' vers R . Puisqu'un événement simultané dans R ne l'est pas dans R' , les distances l et l' ainsi mesurées dans R et R' seront nécessairement différentes!

⇒ Abandon de l'idée que la **distance spatiale** est indépendante de l'état de mouvement.

2 Transformation speciale de lorentz

2.1 Transformation de Lorentz

L'étude des phénomènes électromagnétiques par Lorentz a joué un rôle historique important.

Ayant constaté que **les lois de l'électromagnétisme** n'étaient **pas invariantes par**

transformation de Galilée, il put néanmoins établir qu'elles l'étaient dans une transformation

caractérisée par les équations (relatives au cas spécial où R et R' sont définis dans le cas

particulier mentionné plus haut) :

$$\begin{cases} x' = \gamma(x - Vt) & \text{avec } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \beta = \frac{V}{c} \\ y' = y & z' = z \\ t' = \gamma\left(t - \frac{Vx}{c^2}\right) \end{cases}$$

Tandis que Lorentz s'est contenté de considérer que cette transformation pouvait s'appliquer au cas particulier des lois de Maxwell et de la "force de Lorentz" $\vec{f} = q(\vec{E} + \vec{V} \wedge \vec{B})$, Einstein choisit de postuler que le principe de relativité impliquait la validité générale de la transformation de Lorentz (on peut noter aussi le rôle joué par Poincaré). Pour des vitesses faibles devant c , on retrouve la transformation de Galilée qui n'apparaît plus que comme un cas limite de celle de Lorentz valable pour $v \ll c$.

2.2 Transformation des vitesses

Soit un objet animé d'une vitesse $\vec{u} = \frac{dx}{dt} \vec{i} // \vec{V}$ (dans (R))

$$\begin{cases} dx' = \gamma(dx - Vdt) \\ dt' = \gamma\left(dt - \frac{V}{c^2}dx\right) \end{cases} \rightarrow u' = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\frac{dx}{dt} - V}{1 - \frac{V}{c^2} \frac{dx}{dt}} = \frac{u - V}{1 - \frac{Vu}{c^2}} \text{ (dans (R'))}$$

pour $u = c$, on trouve bien $u' = \frac{u - V}{1 - \frac{Vu}{c^2}} = c$

Remarque : pour $\vec{u} = u_x \vec{i} + u_y \vec{j}$, on $\vec{u}' = \frac{(u_x - V)\vec{i} + (u_y/\gamma)\vec{j}}{1 - \frac{Vu_x}{c^2}}$

2.3 Invariance de l'intervalle et notion de quadrivecteur

Considérons deux "événements" de R : ceux-ci doivent être caractérisés par la donnée de la position **et** du temps (voir notion de simultanéité), soit (x_1, y_1, z_1, t_1) et (x_2, y_2, z_2, t_2) .

On appelle **intervalle** séparant ces deux événements la **quantité** ΔS dont le carré est donné par (le choix du signe - sera justifié plus loin):

$$\Delta S = c^2(t_2 - t_1)^2 - [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2]$$

On montre alors facilement que l'intervalle ainsi défini est un **invariant** dans une transformation de Lorentz, c'est à dire que :

$$\Delta S'^2 = \Delta S^2$$

On peut considérer qu'un point est repéré dans l'espace et le temps par **quatre** coordonnées x, y, z et ct (homogénéité). On peut alors munir cet espace à 4 dimensions (appelé espace-temps ou univers de Minkowski) d'une **métrique pseudo-euclidienne** de signature $(---+)$ où l'intervalle représente la **pseudo-norme du quadrivecteur** $\vec{OM} = (\vec{r}, ct)$ et est invariante par changement de référentiel galiléen. Ce changement de référentiel peut alors être défini sous forme matricielle:

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ ct' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ ct \end{pmatrix}$$

où la matrice 4×4 ainsi définie est la **matrice de Lorentz**.

Remarque :

Pour rendre les formules plus symétriques, on peut aussi poser : $\tau = ict$,

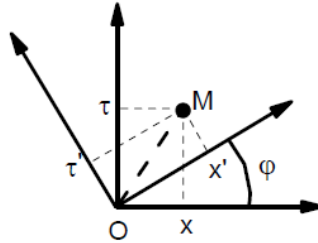
et introduire le quadri-vecteur de composantes $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ \tau = ict \end{pmatrix}$ et de norme euclidienne $-S^2$

On a alors :

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \\ \tau' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & i\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -i\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ \tau \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x' \\ \tau' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & i\gamma\beta \\ -i\gamma\beta & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ \tau \end{pmatrix}$$

Cette matrice ressemble alors à celle d'une rotation des axes d'angle φ dans le plan (x, τ) : $\begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$

avec $\cos\varphi = \gamma$ et $\sin\varphi = i\beta\gamma$ soit $\tan\varphi = i\beta$



(on a bien $\cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$)

Dans une rotation d'axes, la norme du quadri-vecteur $(x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2) = -S^2$

est évidemment conservée, mais les projections sur les axes $(x, \tau \rightarrow x', \tau')$ sont modifiées.

2.4 Dilatation des temps

Soit un point M' immobile dans R' . Par inversion de la formule de Lorentz, on a :

$$t = \gamma \left(t' + \frac{vx'}{c^2} \right) \Rightarrow \Delta t = \gamma \left(\Delta t' + \frac{v\Delta x'}{c^2} \right) = \gamma \Delta t'$$

car, puisque M' immobile dans $R' \Rightarrow \Delta x' = 0$. Comme $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$, $\Delta t \geq \Delta t'$

On peut vérifier expérimentalement cette formule en examinant la désintégration de particules instables : une particule de période T_0 en mouvement dans le référentiel du laboratoire y est observée avec une période apparente $T = \gamma T_0 > T_0$. Pour les particules très rapides accélérées par les machines modernes, γ peut atteindre plusieurs dizaines et la validité de la relation vérifiée avec une grande exactitude (voir aussi Landau et Lifchitz, Théorie du champ, p.17).

2.5 Temps propre

Soit une particule en mouvement par rapport à un référentiel R et occupant le point M à

l'instant t . A l'instant $t+dt$, elle est en $M+dM$. Le carré de l'intervalle séparant ces deux

événements est $dS^2 = c^2(dt)^2 - (dM)^2 = (c^2 - v^2) dt^2$ car $d\mathbf{M} = \mathbf{v} dt$ (on remarque ici que dS^2 est positif car $(c^2 - v^2) \geq 0$).

Cet intervalle (norme du quadri-vecteur) est un invariant par changement de référentiel galiléen.

La quantité dt définie par :

$$dS^2 = c^2 d\tau^2 = (c^2 - v^2) dt^2 = c^2 (1 - \beta^2) dt^2 = \frac{c^2}{\gamma^2} dt^2$$

est donc aussi **un invariant pour la particule** (*attention, ici : $\tau \neq ict$*).

La quantité invariante $d\tau$ peut donc aussi se définir par $d\tau = \frac{dt}{\gamma} \Leftrightarrow dt = \gamma d\tau$ ($\Rightarrow c^2 d\tau^2 = c^2 (1 - \beta^2) dt^2$)

$d\tau$ est appelé **temps propre** de la particule $d\tau = \frac{1}{\gamma} dt$ ($d\tau \rightarrow dt$ si $\frac{v}{c} \rightarrow 0 \Rightarrow \gamma \rightarrow 1$)

2.6 Contraction des longueurs

Reprenons quantitativement le cas de la règle A'B'

$$\Delta x' = l_0 = \gamma(\Delta x - v\Delta t)$$

projection "instantanée" $\Rightarrow \Delta t = 0$ (**dans R !**) $\Rightarrow l = \Delta x = \frac{l_0}{\gamma} \leq l_0$

Attention ! le résultat est bien entendu différent si on opère avec $\Delta t' = 0 \Rightarrow \Delta t \neq 0$

3 Elements de dynamique relativiste

3.1 Introduction :

quadrivitesse

Nous avons introduit précédemment le quadri vecteur $\widetilde{OM} = (\vec{r}, ct)$ dont la (pseudo-) norme est invariante par changement de référentiel galiléen. En mécanique classique, le vecteur vitesse est défini par $\vec{v} = \frac{d\widetilde{OM}}{dt}$. L'extrapolation au quadrivecteur vitesse ne peut se faire par $\frac{d\widetilde{OM}}{dt}$ (la pseudo-norme de $d\widetilde{OM}$ est invariante, mais dt ne l'est pas \rightarrow vecteur de norme non invariante). Nous définirons donc ici le quadrivecteur vitesse par :

$$\vec{v} = \frac{d\widetilde{OM}}{d\tau}$$

où $d\tau$ est le temps propre (invariant) de la particule. La pseudo-norme de ce quadrivecteur est alors bien un invariant

$$d\widetilde{OM} = \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \\ cdt \end{pmatrix}, \quad d\tau = \frac{dt}{\gamma} \rightarrow \vec{v} = \begin{pmatrix} \gamma v_x \\ \gamma v_y \\ \gamma v_z \\ \gamma c \end{pmatrix}$$

Quadrivecteur impulsion-énergie

Soit m la masse de la particule : m est un scalaire invariant. Le quadrivecteur :

$$\vec{P} = m\vec{v}$$

est de pseudo-norme invariante. On a :

$$\tilde{P} = \begin{pmatrix} \gamma m V_x \\ \gamma m V_x \\ \gamma m V_x \\ \gamma m c \end{pmatrix}$$

Pour $v \ll c$, les trois premières composantes de ce 4-vecteur tendent vers celles du vecteur impulsion \vec{p} (ou quantité de mouvement). La définition relativiste de l'impulsion est donc :

$$P = \gamma m \vec{v}$$

Examinons la dernière composante. Pour $v \ll c$,

$$\gamma m c = \frac{m c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \rightarrow m c \left(1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} \right) = m c + \frac{1}{2} \frac{m v^2}{c}$$

En posant :

$$E = \gamma m c^2$$

on a :

$$\lim_{v \ll c} E = m c^2 + \frac{1}{2} m v^2$$

On reconnaît dans le 2^{ème} terme l'expression classique de l'énergie cinétique. Le premier terme, **dû à la masse de la particule**, est appelé **énergie de masse de la particule**.

Finalement, on peut poser

$$\widetilde{OM} = (\vec{r}, ct) \rightarrow \tilde{P} = (\vec{p}, E/c)$$

Pseudo-norme de \tilde{P} :

$$(\tilde{P})^2 = -p^2 + \frac{E^2}{c^2} = -\gamma^2 m^2 v^2 + \gamma^2 m^2 c^2 = \gamma^2 m^2 (c^2 - v^2)$$

(Ceci justifie la métrique $---+$ adoptée plus haut), relation que l'on écrit habituellement :

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \Leftrightarrow (\tilde{P})^2 = m^2 c^2$$

Notons que la transformation du 4-vecteur \tilde{P} est la même que celle du 4-vecteur \widetilde{OM}

$$\begin{pmatrix} p'_x \\ p'_y \\ p'_z \\ E'/c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \\ E/c \end{pmatrix}$$

Energie cinétique

Pour les faibles vitesses, $\vec{p} \cong m\vec{v}$ et $E \cong m c^2 + \frac{1}{2} m v^2$

Dans le cas général, on pose $T = E - m c^2 = (\gamma - 1) m c^2$ ($\rightarrow \frac{1}{2} m v^2$ pour $v \ll c$), T étant l'énergie cinétique de la particule.

Cas du photon

$v = c \Rightarrow \gamma = \infty$: **E fini impose $m = 0$**

Si on pose alors $E = h \nu$, $E^2 - p^2 c^2 = 0$ **quantité de mouvement du photon**

3.2 Equivalence masse-énergie

Considérons le choc de 2 particules de même masse m , animées des vitesses \vec{V} et $-\vec{v}$ dans R .
Supposons qu'après le choc il reste une seule particule de masse M .

- conservation de la quantité de mouvement $\Rightarrow M$ immobile après le choc

- conservation de $E \Rightarrow 2 \gamma m c^2 = M c^2$

$$\Rightarrow \left. \begin{array}{l} M = 2m + 2m(\gamma - 1) \\ \gamma > 1 \end{array} \right\} \Rightarrow M > 2m$$

$$\Delta m = M - 2m = 2m(\gamma - 1) = 2T/c^2$$

puisque $T = (\gamma - 1)mc^2$ pour chacune des particules avant le choc

\rightarrow on a transformé l'énergie (cinétique) $2T$ en masse, ce que l'on écrit quelquefois :

$$\Delta E = c^2 \Delta M$$

("E = mc²"; attention : écriture correcte: $E = \gamma mc^2$!)

Cette équivalence masse-énergie se manifeste couramment au cours des expériences menées avec les grands accélérateurs, ou lors des processus de désintégration radioactive.

Equation du mouvement

La loi fondamentale de la dynamique reste formellement identique à celle de la dynamique newtonienne ; nous définirons en effet la force par la formule :

$$\vec{f} = \frac{d\vec{p}}{dt} \quad (\text{mais avec } \vec{p} = \gamma m \vec{v})$$

On note que le **quadrivecteur-force** doit alors être défini par:

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{d\tau} \quad (\rightarrow \text{invariant}) \Rightarrow \vec{F} = \left(\gamma \vec{f}, \frac{1}{c} \frac{dE}{d\tau} \right)$$

Sous l'action d'une force, on doit en effet avoir

$$dE = \delta W = \vec{f} \cdot d\vec{r} = \vec{f} \cdot \vec{v} dt = \gamma \vec{f} \cdot \vec{v} d\tau \Rightarrow \frac{dE}{d\tau} = \gamma \vec{f} \cdot \vec{v}$$

(en poursuivant le calcul avec $dE = \vec{v} \cdot \vec{f} dt = \vec{v} \cdot d\vec{p} = m \vec{v} \cdot d(\gamma \vec{v})$ on retrouve bien $dE = d(\gamma mc^2)$, ce qui justifie aussi l'expression de \vec{f} ci-dessus)

$$\Rightarrow \vec{F} = \left(\gamma \vec{f}, \frac{\gamma}{c} \vec{f} \cdot \vec{v} \right) \quad (4\text{-vecteur})$$

Des lois de transformation de \vec{F} , on tire celles des composantes de \vec{f} : (v_e : vitesse de R'/R , $\vec{v} = v_x \vec{i} + v_y \vec{j} + v_z \vec{k}$: vitesse de M dans R)

$$\left\{ \begin{array}{l} f'_x = \left(f_x - \frac{V_e}{c^2} (\vec{f} \cdot \vec{V}) \right) / \left(1 - \frac{V_e \cdot V_x}{c^2} \right) \\ f'_y = f_y / \gamma_e \left(1 - \frac{V_e \cdot V_x}{c^2} \right) \\ f'_z = f_z / \gamma_e \left(1 - \frac{V_e \cdot V_x}{c^2} \right) \end{array} \right.$$

On note que : - la force n'est plus invariante par transformation de Lorentz

- si $\vec{f}_1 = -\vec{f}_2$ dans R, **en général** $\vec{f}'_1 \neq \vec{f}'_2$: le principe de l'action et de la réaction n'est plus valable en relativité quand les objets sont en mouvement.

Formulaire

$$\vec{p} = \gamma m \vec{v} \quad E = \gamma mc^2 = T + mc^2 \quad T = (\gamma - 1)mc^2 \quad E^2 - p^2 c^2 = m^2 c^4 = E'^2 - p'^2 c^2$$

Cette invariance de la norme du 4-vecteur reste vraie pour un **système de particules** à condition de poser $E = \sum_i E_i =$ et $\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i$

N.B. : le référentiel du "centre de masse" - défini par $\vec{p} = \sum_i \vec{p}_i^* = 0$ en relativité-est en général non confondu avec le centre de gravité (ou d'inertie) du système.

$$\frac{pc}{E} = \frac{\gamma m v c}{\gamma m c^2} = \frac{v}{c} = \beta \quad \gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} = 1 + \frac{T}{mc^2}$$

$$\beta = \left(1 - \frac{1}{\gamma^2}\right)^{1/2} = \left(1 - \left(\frac{mc^2}{\gamma mc^2}\right)^2\right)^{1/2} = \left(1 - \left(\frac{mc^2}{T + mc^2}\right)^2\right)^{1/2} = \left(1 - \left(\frac{1}{1 + \frac{T}{mc^2}}\right)^2\right)^{1/2}$$

$$pc = \sqrt{E^2 - m^2 c^4} = \sqrt{(T + mc^2)^2 - m^2 c^4} = \sqrt{T(T + 2mc^2)}$$

4 Unites et ordres de grandeur de l'énergie et masse

La loi de conservation de la masse postulée en chimie par Lavoisier n'est qu'une loi approximative ; à cause de l'équivalence masse-énergie ("E = mc²"), c'est en fait l'énergie totale qui se conserve : (par exemple E_{cin} + E_{pot} + E_{masse}). 1 kg → Mc² ≅ 9.10¹⁶ Joules

A cause de cette équivalence, on peut aussi exprimer les masses en équivalent énergie. En physique corpusculaire, une unité commode est l'électron-volt (eV) (1 eV = 1,60217733.10⁻¹⁹ Joules)

On définit l'unité de masse (définition légale 1961) comme 1/12 de la masse du ¹²C

$$1 \text{ u. m.} = \frac{10^{-3}}{6,0221367 \cdot 10^{23}} = 1,6605402 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

ou, en équivalent énergie exprimé en eV:

$$1 \text{ u. m.} = \frac{1,6605402 \cdot 10^{-27} \times (299792458)^2}{1,60217733 \cdot 10^{-19}} = 931,494 \cdot 10^6 \text{ eV}$$

Les valeurs « officielles » étant :

$$1 \text{ u. m.} = 1,6605402(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 931,49432(28) \text{ MeV}/c^2$$

$$\rightarrow m_e = 9,1093897(54) \cdot 10^{-31} \text{ kg} = 0,51099906(16) \text{ MeV}/c^2$$

$$m_p = 1,6726231(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 938,27231(28) \text{ MeV}/c^2$$

$$m_n = 1,6749286(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 939,56563(28) \text{ MeV}/c^2$$

$$m_{\text{He}} = 6,64648 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 4,002600 \times 931,49432 \text{ MeV}/c^2$$