

# Mécanique Quantique

Larbi Rahili

---

Tome 1 - SMP4





# Mécanique Quantique

Larbi Rahili

---

---

Tome 1 - SMP4







L'étude de la physique est aussi une aventure. Vous trouverez cela difficile, parfois frustrant, parfois douloureux et souvent très gratifiant.

**Hugh D. Young.**

# Contents

|          |  |    |
|----------|--|----|
| <b>0</b> | Introduction   | 1  |
| <b>1</b> | Dualité onde-corpuscule : limites de la physique classique     | 4  |
| 1.1      | Cadre de la théorie classique                                  | 5  |
| 1.1.1    | Mécanique des systèmes matériels                               | 5  |
| 1.1.2    | Champs électromagnétiques et lumière                           | 6  |
| 1.2      | Structure corpusculaire de la lumière                          | 6  |
| 1.2.1    | Rayonnement du corps noir                                      | 6  |
| 1.2.2    | Effet photo-electrique   | 9  |
| 1.2.3    | Effet Compton  | 12 |
| 1.3      | Structure ondulatoire des particules matérielles               | 14 |
| 1.3.1    | Introduction   | 14 |
| 1.3.2    | Relations de Planck-Einstein et de De Broglie                  | 15 |
| 1.3.3    | Limites de validité de la mécanique classique                  | 15 |
| 1.3.4    | Expériences justificatives                                     | 16 |
| <b>2</b> | Méca. Ondulatoire - Éq. de Schrödinger                         | 21 |
| 2.1      | Hypothèses fondamentales                                       | 22 |
| 2.1.1    | Fonction d'onde  | 22 |
| 2.1.2    | Différence fondamentale entre état classique et état quantique | 23 |

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 2.2   | Équation de Schrödinger   | 23 |
| 2.2.1 | Introduction  | 23 |
| 2.2.2 | Séparation des variables et états stationnaires                                 | 25 |
| 2.2.3 | Comportement de la fonction d'onde stationnaire à une seule dimension $\phi(x)$ | 26 |
| 2.2.4 | Étude d'une marche de potentiel   | 28 |
| 2.2.5 | Étude d'une barrière de potentiel   | 32 |
| 2.2.6 | Étude d'un puit de potentiel carré : États liés                                 | 38 |
| 2.2.7 | Puits de potentiel carré infini   | 41 |
| 2.2.8 | Cas particulier : Particule dans une boîte rectangulaire                        | 43 |

## 3 Formalisme de la Mécanique Quantique

45

|       |  |    |
|-------|--|----|
| 3.1   | Introduction   | 46 |
| 3.2   | Espace des fonctions d'ondes $\mathcal{J}$                       | 47 |
| 3.2.1 | Produit scalaire associé à $\mathcal{J}$                         | 47 |
| 3.2.2 | Décomposition d'une fonction d'onde sur la base des ondes planes | 48 |
| 3.2.3 | Opérateur associé à la mesure d'une grandeur physique            | 50 |
| 3.3   | Espace des états, Notation de Dirac                              | 53 |
| 3.3.1 | Structure de l'espace $E$ : espace des <i>ket</i>                | 53 |
| 3.3.2 | Structure de l'espace dual $E^*$ : espace des <i>bra</i>         | 54 |
| 3.3.3 | Opérateurs linéaires   | 55 |
| 3.3.4 | Représentations dans l'espace des états $E$ :                    | 58 |
| 3.3.5 | Équations aux valeurs propres d'un opérateur :                   | 60 |
| 3.3.6 | Observables :  | 61 |
| 3.3.7 | Ensembles Complets d'Observables qui commutent (ECOC)            | 63 |

## 4 Postulats de la Mécanique Quantique

64

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 4.1 | Description classique d'un système matériel | 65 |
|-----|---|----|



|        |  |    |
|--------|--|----|
| 4.2    | Description quantique .....  | 66 |
| 4.2.1  | Les Postulats .....  | 66 |
| 4.2.2  | Conservation de la norme .....   | 67 |
| 4.2.3  | Résolution de l'équation de Schrödinger .....  | 67 |
| 4.2.4  | L'opérateur d'évolution .....  | 68 |
| 4.2.5  | Principe de correspondance .....   | 69 |
| 4.2.6  | Valeur moyenne d'une observable .....  | 69 |
| 4.2.7  | Écart quadratique moyen .....  | 70 |
| 4.2.8  | Relation d'incertitude de Heisenberg .....   | 70 |
| 4.2.9  | Équation de Schrödinger des systèmes conservatifs .....                                  | 71 |
| 4.2.10 | Évolution de la valeur moyenne d'une observable : Théorème d'Ehrenfest .....             | 72 |
| 4.3    | Exemples d'application .....   | 74 |
| 4.3.1  | Exemple 1 : Application des postulats de la mesure .....                                 | 74 |
| 4.3.2  | <i>Solution 1</i> .....  | 75 |
| 4.3.3  | Exemple 2 : Evolution d'un système dans un champ magnétique (Théorème d'Ehrenfest) ..... | 84 |
| 4.3.4  | <i>Solution 2</i> .....  | 84 |

## 5 Oscillateur Harmonique à une dimension

89

|       |  |    |
|-------|--|----|
| 5.1   | Étude en mécanique classique .....                                       | 90 |
| 5.2   | Étude en mécanique quantique .....                                       | 91 |
| 5.2.1 | Recherche des valeurs propres de $H$ (énergies) .....                    | 91 |
| 5.2.2 | Recherche des kets propres de $H$ .....                                  | 93 |
| 5.2.3 | Représentation matricielle des opérateurs $a$ , $a^+$ , $N$ et $H$ ..... | 94 |

## 1 Annexe A

95

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 1.1 | Densité d'énergie du corps noir en mécanique classique ..... | 96 |
|-----|--|----|

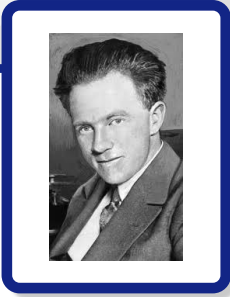
|  |     |
|--|-----|
| 1.2 Densité d'énergie du corps noir en mécanique quantique ..... | 97  |
| 1.3 Énergie totale du rayonnement d'un corps noir .....          | 100 |
| 1.4 Équation de conservation .....                               | 100 |
| 1.5 Exemple d'application de l'Effet Tunnel en physique ..       | 101 |

## **2** Annexe B 104

|  |     |
|--|-----|
| 2.1 Principe d'incertitude de Heisenberg ..... | 105 |
|--|-----|



# 0. Introduction



L'objet de la recherche n'est plus la nature en soi, mais la nature livrée à l'interrogation humaine, est dans cette mesure l'homme ne rencontre ici que lui-même.

— Werner Heisenberg

Ces notes de cours constituent une introduction générale à la physique quantique et le formalisme mathématique qui l'encadre, permettant ainsi à vous en tant qu'étudiant(e)s débutant(e)s d'acquérir les fondements et les outils de base nécessaires pour pénétrer ce monde invisible. Ainsi, en mettant à profit ces informations, vous devez servir d'exemple aux futurs étudiant(e)s, en contribuant à simplifier cette branche de la physique, qui dissimule une question plus délicate : comment ça se fait que cette science est indispensable pour comprendre la quasi-totalité de la physique contemporaine ?

À mon humble avis, je suis convaincu que la  $\phi$ -quantique est généralement se rapporte à l'infiniment petit, MAIS parfois, cette science peut se comprendre par de simples métaphores. En plus, le point fort qu'elle possède réside dans le fait qu'elle remet profondément en cause nos intuitions les plus élémentaires, et peut-être ça qui la rend difficile à appréhender. Par exemple, à l'échelle des atomes et des électrons, de nombreuses équations de la mécanique classique, qui décrivent la façon dont les choses se déplacent à des tailles et des vitesses courantes, cessent d'être utiles. Ceci étant dit, je m'empresse d'ajouter que si en mécanique classique, les objets existent à un endroit spécifique et à un moment spécifique, et bien, ce n'est pas du tout le cas en mécanique quantique, où les objets existent dans un brouillard de probabilités; et donc ils ont une certaine chance d'être au point A, une autre chance d'être au point B et ainsi de suite.

Bref, le reste de ces notes est comme suit : [Chapitre 1](#) marque le début de la chute de la physique classique vis-à-vis quelques constats expérimentaux, en servant d'intermédiaire vers la physique quantique. À cet égard, la dualité onde-corpuscule pour la lumière est introduite. Dans le [Chapitre 2](#), on expose comment Schrödinger a établi la correspondance classique-quantique afin de généraliser l'approche de Broglie (dualité) aux particules massives non-relativistes soumises à une force dérivant d'une énergie potentielle.

Le formalisme mathématique et postulats de la mécanique quantiques ont compté parmi les principales questions examinées lors de l'élaboration de ces notes, et le détail de ces

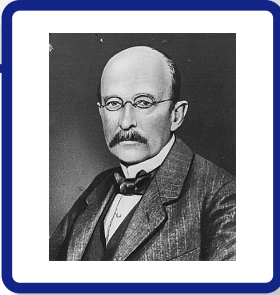
deux concepts s'est donné respectivement dans [Chapitre 3](#) et [Chapitre 4](#). Enfin, il convient de mentionner que chaque fois que cela a été nécessaire, on a fourni le détail de quelques exemples physique. Aussi, il y a de courtes annexes supplémentaires vers la fin de ces notes. Les bibliographies répertorient de nombreux ouvrages et documents de recherche, et sites Web utiles



Larbi Rahili



# 1. Dualité onde-corpuscule : limites de la physique classique



Une théorie nouvelle ne triomphe jamais. Ce sont ses adversaires qui finissent par mourir.

— Max Karl Ernst Ludwig Planck

## 1.1 Cadre de la théorie classique

À la fin du 19<sup>e</sup> siècle, la physique a été principalement basée sur deux théories fondamentales :

- La mécanique Newtonienne : qui décrit le comportement des objets Macroscopiques
- La théorie de l'électromagnétisme de Maxwell qui décrit la propagation de la lumière comme étant des ondes électromagnétiques

Dans ce sens, notre univers est composé de deux composantes : la matière et le rayonnement. Les corps matériels sont caractérisés par leur masse, par contre le rayonnement est défini par un champ électromagnétique dont la nature, du point de vue de la physique classique, est fondamentalement différente de la matière.

### 1.1.1 Mécanique des systèmes matériels

L'état dynamique d'un système de particules qui évolue dans l'espace-temps est défini par la connaissance à tout instant  $t$  des variables  $x(t)$  et  $v(t)$ .

L'évolution du système est gouvernée par les lois de Newton, dont l'équation :

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F} \quad (1.1)$$

Les forces  $\vec{F}$  agissant sur une particule dépendent généralement de la position des autres particules. L'équation (1.1) constitue un système couple d'équations différentielles du second

ordre, dont la résolution permet d'avoir  $x$  en fonction de  $t$ . La connaissance de  $x(t)$ ,  $v(t)$  et la donnée des conditions initiales caractérisent de façon complète l'état dynamique du système.

### 1.1.2 Champs électromagnétiques et lumière

La découverte des phénomènes d'interférence et de polarisation a introduit le caractère ondulatoire de la lumière décrit par la théorie électromagnétique de Maxwell. Cette théorie est régie par les quatre équations de Maxwell :

$$\operatorname{div} \vec{E} = \rho / \epsilon_0 \quad \text{équation de Maxwell-Gauss} \quad (1.2)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad \text{équation de Maxwell-Thomson} \quad (1.3)$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \text{équation de Maxwell-Faraday} \quad (1.4)$$

$$\operatorname{rot} \frac{\vec{B}}{\mu_0} = \vec{j} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad \text{équation de Maxwell-Ampère} \quad (1.5)$$

À partir de ces équations, on détermine les équations de propagation des champs électrique et magnétique dans l'espace-temps. La simple variation de l'un des deux champs entraîne l'apparition de l'autre, d'où la dualité électrique-magnétique.

Une différence fondamentale entre la matière et le rayonnement provient de la notion de localisation. En effet, si le point matériel est localisé dans l'espace, il est impossible de diviser la lumière en corpuscules localisables et de maintenir cette localisation dans le temps. Ainsi, la donnée de  $\vec{E}$  et  $\vec{B}$  en tout point de l'espace à l'instant  $t$  permet une description complète de l'état du champ électromagnétique.

Les concepts classiques du point matériel et du champ électromagnétique s'excluent mutuellement. Le premier admet la notion de localisation, alors que le second est basé sur la notion de propagation. Par conséquent, partant de ces concepts classiques, il est impossible de concevoir une particule possédant des propriétés ondulatoires, ou une onde électromagnétique développant un caractère corpusculaire.

## 1.2 Structure corpusculaire de la lumière

### 1.2.1 Rayonnement du corps noir

Définition : toute enceinte isotherme, imperméable au rayonnement et parcourue par une onde électromagnétique isotrope et homogène est appelée *corps noir*.

Historiquement : le corps noir est l'une des premières expériences qui a permis de dégager le concept de *quanta*, et par conséquent la naissance de la mécanique quantique. L'expérience relative au corps noir consiste à porter à une température  $T$  une enceinte vide isolée thermiquement. On constate alors les faits suivants :



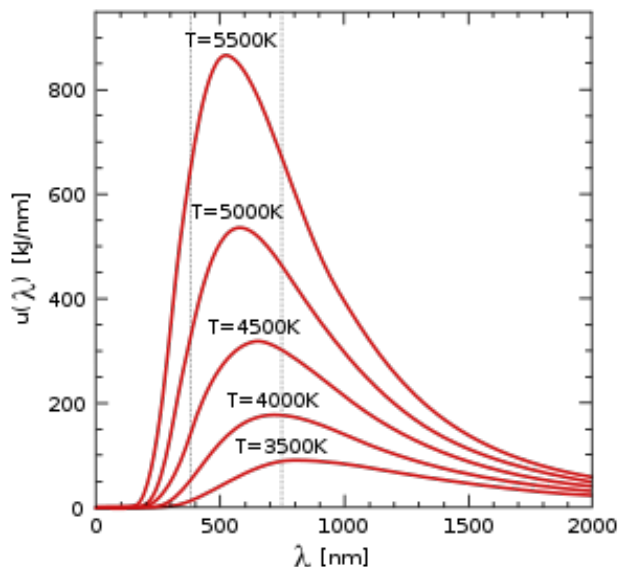


Figure 1.1: Distribution spectrale d'énergie du rayonnement  $u(\lambda)$  en équilibre d'un corps noir.

- à l'intérieur de l'enceinte règne un rayonnement électromagnétique à spectre continu dépendant seulement de  $T$ ,
- la densité d'énergie mesurée est une fonction de la fréquence  $\nu$  et de  $T$  dont l'allure est représentée sur la figure (1.1) suivante :

La densité d'énergie  $u(\lambda, T)$  est nulle aussi bien pour les faibles longueurs d'ondes que pour les grandes longueurs d'ondes. Elle présente un maximum pour une longueur d'onde  $\lambda_{max}$  dépendant simplement de la température.

Rayleigh et Jeans ont postulé que le champ électromagnétique à l'intérieur de l'enceinte est équivalent à un ensemble d'oscillations harmoniques indépendants et qu'à l'équilibre thermique la densité d'énergie est donnée par :

$$u = u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \langle E \rangle \quad (1.6)$$

où le rapport  $8\pi\nu^2/c^3$  représente le nombre des oscillateurs harmoniques (O.H) par unité de volume, tandis que  $\langle E \rangle$  est la valeur moyenne de l'énergie mécanique d'un OH, avec  $E = E_c + E_p$ ,  $E_c$  représente l'énergie cinétique de l'OH et  $E_p$  son énergie potentielle;  $c = 2.9979246 \times 10^8$  m/s est la vitesse de la lumière.

Traitement classique

En thermodynamique statistique<sup>1</sup>, le théorème de l'équipartition de l'énergie stipule que :

$$\langle E_c \rangle \equiv \langle E_p \rangle \equiv \frac{1}{2} k_B T \Rightarrow \langle E \rangle = 2 \langle E_c \rangle = k_B T = \beta^{-1} \quad (1.7)$$

$$\Rightarrow u = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \nu^2 \equiv \frac{8\pi k_B T}{c} \frac{1}{\lambda^2} \quad (1.8)$$

où  $\beta = \frac{1}{k_B T}$  est la température inverse, et parfois dite bêta thermodynamique.

Cette formule est en contradiction avec les mesures expérimentales : en effet, la forme parabolique de la densité d'énergie dans (1.8) ne reproduit pas l'allure expérimentale de  $u$  montrée dans la figure (1.1). D'autre part, l'énergie totale contenue dans l'enceinte est infinie pour faibles longueurs d'onde; c'est la catastrophe de l'ultra-violet.

Traitement quantique

En 1900, Max Planck a postulé que chaque OH de fréquence  $\nu$  ne peut recevoir ou donner d'énergie que par paquet d'amplitude  $h\nu$ ; où  $h$  est une constante dite de Planck. En plus, par interprétation de la loi de Rayleigh et Jeans, il réussit à montrer que l'énergie moyenne<sup>2</sup> d'un OH s'écrit :

$$\langle E \rangle \equiv \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} \Rightarrow u(\nu, T) \equiv \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\beta h\nu} - 1} \Leftrightarrow u(\lambda, T) \equiv \frac{8\pi h}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\beta hc/\lambda} - 1} \quad (1.9)$$

cette dernière formule de  $u$  décrit parfaitement les résultats expérimentaux. En plus, la densité d'énergie total  $u$  est finie. Par ailleurs, une étude asymptotique de  $u$  permet de lister les deux points suivants :

- Pour les basses fréquences :

$$h\nu \ll k_B T \Rightarrow e^{\beta h\nu} - 1 \sim \beta h\nu \equiv \frac{h\nu}{k_B T} \Rightarrow u \sim \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2 \sim \frac{8\pi}{c} \frac{k_B T}{\lambda^2} \quad (1.10)$$

la densité d'énergie est identique à l'expression de  $u$  formulée par Rayleigh et Jeans

- Pour les hautes fréquences :

$$h\nu \gg k_B T \Rightarrow \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1} \sim e^{-\beta h\nu} \Rightarrow u \sim \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-\beta h\nu} \sim \frac{8\pi h}{\lambda^3} e^{-\beta hc/\lambda} \quad (1.11)$$

on retrouve dans ce cas la loi de déplacement de Wien en annulant la dérivée de  $u$  par rapport à  $\lambda$  :  $\lambda_{max} T = \text{constante}$ .

Ce résultat théorique est en accord avec les faits expérimentaux.

L'énergie totale  $\mu$  du rayonnement à l'intérieur de la cavité est obtenue en sommant la densité d'énergie  $u$  sur toutes les fréquences  $\nu$ . On montre qu'elle est proportionnelle à  $T^4$  conformément à la loi de Stefans<sup>3</sup>.

<sup>1</sup>Veuillez voir section 1.1 de l'annexe 1 pour plus de détails sur le calcul de la valeur moyenne de l'énergie en mécanique classique

<sup>2</sup>Veuillez voir section 1.2 de l'annexe 1 pour plus de détails sur le calcul de la valeur moyenne de l'énergie en mécanique quantique

<sup>3</sup>Veuillez voir section 1.3 de l'annexe 1 pour plus de détails sur ce calcul

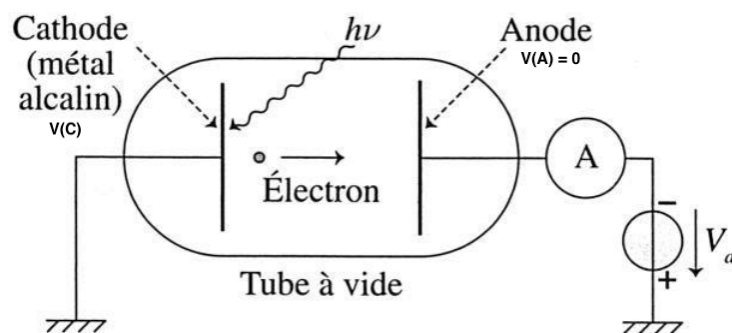


Figure 1.2: Montage expérimental pour étudier l'effet photo-électrique.

## 1.2.2 Effet photo-électrique

### a) Introduction

L'effet photo-électrique est l'émission d'électrons observés lorsqu'on irradie sous vide un métal alcalin avec un rayonnement lumineux dans l'ultraviolet. Il a été mis en évidence en 1887 par Heinrich Hertz et avec Wilhelm Hallwachs sans qu'ils sachent parfaitement l'identité des charges négatives extraites de la plaque irradiée par la lumière. D. Lenard et ses collaborateurs ont identifiés ces charges négatives à partir de la technique de spectrographie de masse comme étant des électrons.

Son étude montre que l'énergie lumineuse est absorbée par *quanta*  $h\nu$ , pour une fréquence  $\nu$ , cette absorption provoquant l'arrachement des électrons depuis l'intérieur du cristal.

### b) étude expérimentale

le montage expérimental (figure 1.2) consiste en un tube où règne le vide, dans lequel la cathode C (au potentiel  $V_C$ ) est soumise à un rayonnement visible ou ultra-violet. L'anode A (au potentiel  $V_A = 0$ ) est une grille pour collecter les électrons émis.

Si on mesure le courant photo-électrique  $i$  en fonction de la différence de potentiel  $V_C$ , on constate les faits expérimentaux suivants :

- le nombre d'électrons émis, i.e. courant  $i$ , est proportionnel à l'énergie (intensité) lumineuse. Tous les électrons émis sont collectés lorsque le potentiel  $V_C$  est suffisamment négatif pour atteindre le courant de saturation  $i_m$  (voir figure 1.3). Ce dernier mesure donc le nombre d'électrons émis par une lumière monochromatique envoyée sur la cathode.
- Si à la cathode un potentiel positif [ $V_C > 0$ ] est appliqué, le courant  $i$  décroît et devient nul pour une valeur  $V_0 = U_0$  ne dépendant que de la fréquence de la lumière monochromatique.  $|V_0|$  est appelée tension seuil ou contre tension.

On déduit que les électrons collectés par l'anode sont ceux dont l'énergie cinétique est supérieure à la barrière d'énergie  $eV_0$ . en appliquant le théorème de conservation

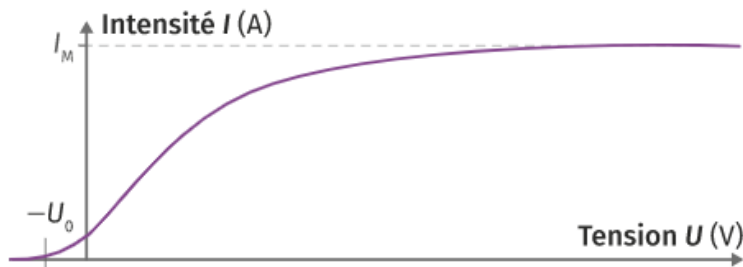


Figure 1.3: Allure du courant photo-électrique  $i$  en fonction de la tension  $U = V_C$  [La tension seuil est notée par  $V_0 = U_0$ ].

d'énergie entre la cathode et l'anode on obtient :

$$\frac{1}{2}mv_C^2 - eV_C = \frac{1}{2}mv_A^2 - eV_A = \frac{1}{2}mv_A^2 \quad (1.12)$$

où  $v_A$  et  $v_C$  sont respectivement les vitesses des électrons à l'anode et à la cathode; et  $e = 1.6 \times 10^{-19} C$  la valeur absolue de la charge de l'électron.

On en déduit que :

$$\frac{1}{2}m(v_C^2 - v_A^2) = eV_C \quad (1.13)$$

et l'énergie cinétique maximale atteinte par les électrons sera :

$$\frac{1}{2}mv_{max}^2 = e|V_0| \quad (1.14)$$

L'expérience montre deux faits importants sur  $V_0 = U_0$  :

1. Le maximum d'énergie cinétique des électrons émis, c'est-à-dire  $eV_0$ , est indépendant de l'intensité de la lumière monochromatique utilisée.

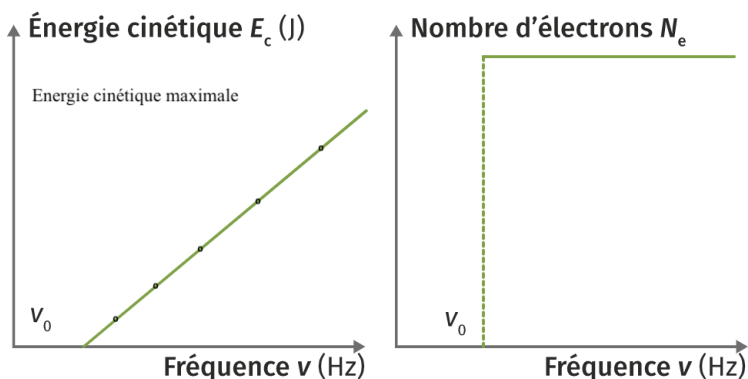


Figure 1.4: Allure de  $eV_0$  [gauche] et nombre d'électrons éjectés  $N_e$  [droite] en fonction de la fréquence  $\nu$ .

2. ce maximum n'est fonction que de la fréquence  $\nu$ , c'est-à-dire de la couleur de la lumière (voir figures 1.4 et 1.5). La courbe expérimentale de  $eV_0$  en fonction de la fréquence, est une droite dont la pente apparaît comme une constante universelle, qu'on désigne par  $h$  :

$$\frac{1}{2}mv_{max}^2 = -eV_0 = h(\nu - \nu_0) \quad (1.15)$$

où  $h = 6.624 \times 10^{-34}$  J.s, est la constante de Planck.

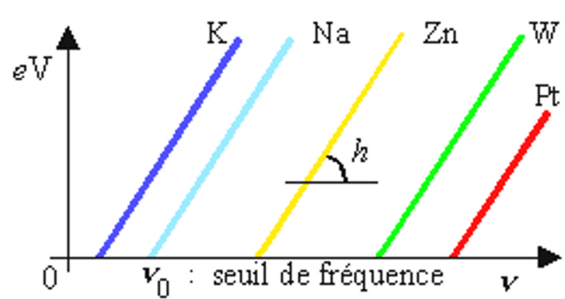


Figure 1.5: Différentes variations de  $eV$  en fonction de la fréquence  $\nu$ .

#### Remarque :

Si on envoie une fréquence inférieure à  $\nu_0$ ,  $v_{max}$  sera égale à zéro. Aucun électron ne sera extrait. Par conséquent, avec de la lumière rouge aucun électron n'est émis d'une feuille de Zinc, alors qu'avec de la lumière U.V, on peut extraire les électrons.

Ces nouvelles propriétés ne peuvent pas être expliquées à partir des lois de la physique classique. En effet en augmentant l'intensité de l'onde lumineuse il est possible d'arracher les électrons du métal et obtenir ainsi un courant. Ceci est en contradiction avec le résultat de l'expérience.

#### Explication qualitative d'Einstein :

Bien qu'avant la mesure précisée par R. A. Millikan en 1916 de la fréquence lumineuse et de l'énergie des électrons, Einstein suggéra en 1905 une explication du phénomène; il admet l'hypothèse des échanges d'énergies quantifiées entre le rayonnement et la matière : l'énergie d'un faisceau de lumière de fréquence  $\nu$ , se déplace par paquets d'énergie  $h\nu$  appelé "quantum d'énergie". Ce quantum d'énergie  $h\nu$  est transmis complètement à un électron lui permettant de s'arracher au métal avec une énergie cinétique :

$$E_c = h\nu - W_e \quad (1.16)$$

où  $W_e = h\nu_0$  est le travail d'extraction du métal.

L'électron ne peut s'arracher à l'attraction du métal que si l'énergie qui lui est transmise est supérieure ou égale à  $W_e$  :

$$h\nu \geq W_e = h\nu_0 \Rightarrow \nu \geq \nu_0 \quad (1.17)$$

ceci permet d'expliquer facilement la fréquence seuil de l'effet photo-électrique. Par la suite, les expériences de Millikan confirmèrent le bien-fondé de la théorie d'Einstein.

Remarque :

Lorsque le potentiel  $V_C$  atteint la valeur  $V_0$ , le courant d'électrons s'arrête et on mesure le rapport  $h/e$ . Millikan le trouvait égal à  $4.124 \times 10^{-15}$  V.s, ce qui donnait une valeur de la constante de Planck  $h = 6.626 \times 10^{-34}$  J.s

**c) Nécessité de l'existence des photons**

L'effet photo-électrique montre clairement l'aspect corpusculaire de la lumière. Elle peut être considérée comme étant formée de *gains d'énergie* ou *quanta d'énergie* appelés *photons*.

La théorie électromagnétique classique est incapable d'interpréter l'effet photo-électrique. Elle n'en donne qu'une description quantitative : l'énergie des électrons émis, excités par le champ électromagnétique devrait croître avec l'énergie du rayonnement qui est proportionnelle au carré de l'amplitude. N'importe quelle fréquence devrait alors permettre l'extraction des électrons si l'intensité lumineuse du rayonnement est suffisante. Or l'expérience montre que pour arracher un électron il faut disposer d'une lumière de fréquence finie au moins égale à  $\nu_0$ . On en déduit aussi que le photon a nécessairement une énergie finie  $E$  et que celle-ci doit être proportionnelle à sa fréquence  $\nu$  :

$$E \equiv h\nu \quad (1.18)$$

or comme  $\nu = 1/T$  et  $\lambda = cT = c/\nu$ , alors :

$$E = hc/\lambda \quad (1.19)$$

Ordre de grandeurs :

Pour une radiation visible par exemple :

$$\lambda = 4000\text{\AA}, E = \frac{6.626 \times 10^{-34} \cdot 3 \times 10^{+8}}{4 \times 10^3 \times 10^{-10} \cdot 1.6 \times 10^{-19}} = 3eV \quad (1.20)$$

si on prend  $\lambda = 8000 \text{\AA}$ , l'énergie correspondante est de l'ordre de  $E = 1.5 eV$ .

**1.2.3 Effet Compton****a) Introduction**

L'effet Compton (1923) est un phénomène de diffusion d'un photon par un électron initialement au repos (voir figure 1.6). C'est un phénomène de choc photon-électron produit par pénétration de rayons X dans un solide. Il établit que la quantité de mouvement du photon,  $p = E/c$  où  $c$  est la vitesse de la lumière, est susceptible d'être en partie communiquée à un électron, c'est à dire doit être prise en compte dans la conservation des quantités de mouvement qui caractérise le choc.

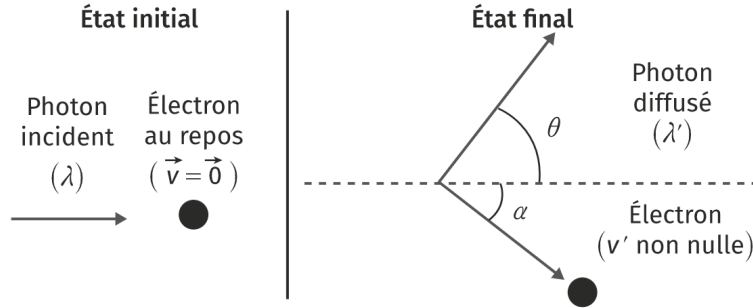


Figure 1.6: Schématisation du principe de la collision photon-électron.

### a) Étude expérimentale

On étudie le spectre de fréquence des rayons  $X$  diffusés par un cristal de graphite en fonction de l'angle  $\theta$  de diffusion. Les rayons  $X$  incidents sont filtrés et sont quasi monochromatiques,  $\lambda_0$ . On observe que le rayonnement diffuse contient deux fréquences : outre la fréquence incidente  $\nu_0$ , une deuxième fréquence légèrement inférieure est également présente. La différence de fréquences varie comme  $\sin^2(\theta/2)$ .

Le rayonnement incident pénètre le cristal de graphite et vient exciter les électrons faiblement liés qui s'y trouvent. Si seul le caractère ondulatoire était vrai, le champ électromagnétique incident devrait faire osciller ceux-ci à la même fréquence  $\nu_0$ . Ces oscillations forcées exécutées par les électrons, génèrent un rayonnement électromagnétique qui est émis, selon la théorie de Maxwell, à la fréquence  $\nu_0$  des oscillations. Ainsi, l'apparition d'une deuxième fréquence dans le rayonnement diffuse ne peut être expliquée dans le cadre de l'électromagnétique classique.

Durant le choc électron-photon, une partie de l'énergie du photon est transmise à l'électron : le photon n'est pas ralenti, puisqu'il conserve la vitesse de la lumière, mais simplement son énergie, de la forme  $h\nu$ , est inférieure à son énergie initiale.

### c) Étude du choc élastique entre le photon et l'électron

Avant le choc, l'électron de masse  $M_e$  est au repos ( $v_e^0 = 0$ ), et le photon incident d'énergie  $E_\gamma^0 = h\nu_0$  a une quantité de mouvement  $p_\gamma^0 = h\nu_0/c$ . Après le choc, la masse de l'électron en mouvement devient,  $m_e = M_e/\sqrt{1-\beta^2}$  où  $\beta = v_e/c$ , alors que le photon a une énergie  $h\nu$  et une quantité de mouvement  $p_\gamma^0 = h\nu/c$ .

Les équations traduisent la conservation des quantités de mouvement et de l'énergie cinétique s'écrivent :

$$\vec{p}_\gamma^0 = \vec{p}_\gamma + m_e \vec{v}_e \quad (1.21)$$

$$M_e c^2 + p_\gamma^0 c = m_e c^2 + p_\gamma c \quad (1.22)$$

ces dernières équations peuvent s'écrire sous la forme :

$$\vec{p}_\gamma^0 - \vec{p}_\gamma = m_e \vec{v}_e \quad (1.23)$$

$$M_e c + p_\gamma^0 - p_\gamma = m_e c \quad (1.24)$$

en les élevant au carré, on obtient :

$$p_\gamma^{0^2} + p_\gamma^2 - 2\vec{p}_\gamma^0 \cdot \vec{p}_\gamma = m_e^2 v_e^2 \quad (1.25)$$

$$p_\gamma^{0^2} + p_\gamma^2 + M_e^2 c^2 - 2p_\gamma p_\gamma^0 + 2M_e c (p_\gamma^0 - p_\gamma) = m_e^2 c^2 \quad (1.26)$$

la différence entre les équations [1.25] et [1.26] donne

$$m_e^2 (c^2 - v_e^2) = M_e^2 c^2 + 2M_e c (p_\gamma^0 - p_\gamma) + 2\vec{p}_\gamma^0 \cdot \vec{p}_\gamma - 2p_\gamma^0 p_\gamma \quad (1.27)$$

on en déduit que :

$$M_e c (p_\gamma^0 - p_\gamma) = p_\gamma^0 p_\gamma (1 - \cos \theta) \quad (1.28)$$

Par conséquent,

$$p_\gamma = \frac{M_e c p_\gamma^0}{M_e c + p_\gamma^0 (1 - \cos \theta)} \equiv \frac{p_\gamma^0}{1 + p_\gamma^0 (1 - \cos \theta) / (M_e c)} \quad (1.29)$$

De plus comme  $p_\gamma = h\nu/c = h/\lambda$  et  $p_\gamma^0 = h\nu_0/c = h/\lambda_0$  où  $\lambda$  et  $\lambda_0$  sont respectivement les longueurs d'ondes des photons diffusés et incidents, alors :

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\frac{1}{\lambda_0}}{1 + \frac{h}{M_e c \lambda_0} (1 - \cos \theta)} \equiv \frac{1}{\lambda_0 + \frac{h}{M_e c} (1 - \cos \theta)} \quad (1.30)$$

$$\Rightarrow \lambda = \lambda_0 + \frac{h}{M_e c} (1 - \cos \theta) \quad (1.31)$$

$$\Rightarrow \Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{M_e c} (1 - \cos \theta) = \frac{2h}{M_e c} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) = 2\lambda_c \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (1.32)$$

où  $\lambda_c = \frac{h}{M_e c} = 0.0242 \text{ \AA}$  est la longueur d'onde de Compton de l'électron.

Remarque :

La longueur d'onde  $\lambda$  est très faible,  $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 10^{-2}$ . Les mesures obtenues sur le graphite ont conduit à la valeur  $\lambda_c = 0.02424 \text{ \AA}$ , la valeur théorique étant égale à  $0.02426 \text{ \AA}$ . La différence provient du fait que les électrons ne sont pas libres contrairement à ce qui a été suppose dans les calculs théoriques.

## 1.3 Structure ondulatoire des particules matérielles

### 1.3.1 Introduction

La contradiction que nous avons remarque dans la structure de la lumière entre caractère onde-corpuscule, s'étend aussi aux particules matérielles auxquelles nous nous sommes habitués.

Toutes les particules de la microphysique (molécules, atomes, photons, électrons, protons, neutrons, mésons, etc ..) présentent à la fois ces deux caractères. En fait, les concepts de corpuscules et d'onde ne sont que deux approximations et il faut se garder de considérer les micro particules comme les ondes ou comme des corpuscules seulement, mais bien d'entités matérielles nouvelles ayant le double aspect ondulatoire et corpusculaire.



### 1.3.2 Relations de Planck-Einstein et de De Broglie

La dualité onde-corpuscule des particules quantiques est traduite par deux importantes formules. Ce sont les formules de Planck-Einstein (1900-1904) et de De Broglie (1924) qui lient l'énergie  $E$  à la fréquence  $\nu$  et la quantité de mouvement  $p$  au vecteur d'onde  $k$  :

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1.33)$$

et

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (1.34)$$

où  $\hbar = h/(2\pi) = 1.05 \times 10^{-34}$  J.s est la constante de Planck normalisée. Comme  $k = 2\pi/\lambda$ , alors

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{h}{p} \quad (1.35)$$

### 1.3.3 Limites de validité de la mécanique classique

La constante de Planck  $h$  est un étalon pour délimiter le domaine de la validité de la mécanique classique. C'est comme la vitesse de la lumière  $c$  qui sépare le domaine des effets relativistes à celui des effets non relativistes (classique). C'est-à-dire :

- si la vitesse  $v \ll c$  on a affaire à un traitement classique
- si la vitesse  $v \sim c$  on a affaire à un traitement relativiste,

#### a) Analyse dimensionnelle

Dans le système des unités internationale SI (MKSA) nous analysons la dimension de la constante de Planck  $h$  ou  $\hbar$ .

On a l'énergie  $E = h\nu = \hbar\omega$

La dimension de l'énergie  $[E] = ML^2T^{-2}$  et la dimension de  $[\omega] = T^{-1}$  ce qui signifie que la dimension de  $[\hbar] = ML^2T^{-1}$ , avec  $M$  : masse,  $L$  : longueur et  $T$  : temps.

On appelle *action*  $A$  toute grandeur de dimension  $ML^2T^{-1}$ ; autrement dit :  $[A] = [\text{Énergie}][\text{temps}] = ML^2T^{-1}$ , ce qui est compatible avec l'une de deux définitions :

- $[A] = [\text{Quantité de mouvement}][\text{Longueur}] = ML^2T^{-1}$
- $[A] = [\text{Moment cinétique}][\text{angle}] = ML^2T^{-1}$ .

#### b) Conséquence

Quand dans un système physique, une variable ayant les dimensions d'une action,  $ML^2T^{-1}$ , prend une valeur numérique de l'ordre de la constante de Planck, le système doit être étudié par la mécanique quantique. Par contre, si la variable de la dimension d'une action a une valeur beaucoup plus grande que celle de  $h$ , les lois de la mécanique classique sont applicables. Il est à noter que le présent critère n'est qu'approximatif; il existe des systèmes où la variable d'action est petite et où la mécanique quantique

n'est pas totalement inapplicable. Inversement, il existe des systèmes macroscopiques qui présentent des phénomènes quantiques comme les lasers, les métaux supraconducteurs, l'hélium superfluide, ....etc

### 1.3.4 Expériences justificatives

On sait que pour mettre en évidence les propriétés ondulatoires de la lumière il est indispensable que certaines grandeurs caractéristiques de l'appareillage soient comparables à la longueur d'onde de la lumière. De même, pour souligner l'aspect ondulatoire de la particule quantique, grâce à une expérience de diffraction par exemple, un réseau de diffraction dont le pas est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de De Broglie de la particule est primordiale.

#### Ordre de grandeur :

Si les particules incidentes sont des électrons non relativistes de masse  $m$  et accélérés par une différence de potentiel de potentiel [d.d.p]  $V$ , la grandeur d'onde de De Broglie associées est :

$$\lambda = \frac{h}{2m_e V} \approx \frac{12.3}{\sqrt{V}} \text{ \AA} = \frac{1.23}{\sqrt{V}} \text{ nm} \quad (1.36)$$

#### Exemple :

Si  $V = 150 \text{ V}$ ,  $\lambda$  sera de l'ordre de  $1 \text{ \AA}$ . Cette valeur est de l'ordre de grandeur du pas des cristaux (réseaux d'atomes régulièrement espacés)

#### Remarque :

La formule [1.36] montre que la longueur d'onde  $\lambda$  est inversement proportionnelle à la masse  $m$  de la particule.

#### a) Expérience de Davison et Germer

Davison et Germer (1927) ont obtenu avec des pinceaux d'électrons monocinétiques réfléchis sur des cristaux, des figures de diffraction analogues à celles que donneraient des rayons X. Le faisceau d'électrons provient d'un canon d'électrons. Ils ont une énergie de  $50 \text{ eV}$  et arrivent en incidence sur un plan particulier d'un cristal de nickel placé dans le vide. Les électrons, dont l'énergie est faible, ne pénètrent pas à l'intérieur du cristal et la diffusion provient des atomes du cristal situés à la surface de celui-ci; voir figure [1.7]. On montre que les maximums de diffraction sont obtenus lorsque la différence de marche pour deux électrons arrivant sur deux centres de diffusion voisins, soit  $2d \sin(\theta)$ , est égale à un nombre entier, de longueur d'onde  $\lambda$  :

$$2d \sin(\theta) \equiv n\lambda \quad (1.37)$$

$d$  est la distance entre deux plans réticulaires comme le montre la figure, et  $\theta$  l'angle de diffraction.

Cette relation s'appelle la loi de réflexion de Bragg. Elle permet de déterminer  $\lambda$  si on connaît  $n$  et  $d$ .

*Exemple :*

Avec  $d = 2.15 \text{ \AA}$  et  $V = 54 \text{ Volt}$ , on observe un maximum pour  $\theta = 50^\circ$ . Pour  $n = 1$ , on obtient expérimentalement  $\lambda = 1.65 \text{ \AA}$  et à partir de la loi de Bragg, on trouve  $\lambda = 1.67 \text{ \AA}$ , en excellent accord avec la valeur mesurée.

### a) Expérience de Thomson

Expérience de Thomson (1927) consiste à envoyer un faisceau monochromatique d'électrons sur un échantillon formé par un ensemble de petits cristaux placés au hasard sur un film d'une autre substance, par exemple de petits cristaux d'étain blanc de  $300 \text{ \AA}$  sur un film de mono-oxyde de silicium de  $10^{-5} \text{ cm}$  d'épaisseur. Une plaque photo est placée perpendiculairement à la direction d'incidence, derrière l'échantillon. Les électrons sont diffusés par les atomes des couches superficielles et des couches profondes. On observe une série d'anneaux de diffraction provenant de l'interférence de tous les électrons diffusés et dont la disposition dépend de la structure des cristaux.

Dans chaque cristal, on regroupe les atomes selon un système de plans équidistants appelés plans réticulaires. Chaque système de plan réticulaires est caractérisé par la distance de deux plans voisins ou distance inter-réticulaire  $d$ . Considérons une onde plane en incidence sur un plan réticulaire quelconque avec un angle d'incidence  $\theta$  (figure 1.7). La condition pour que les ondes diffusées par deux plans réticulaires adjacents soient en phase est obtenue en comparant les trajets optiques des rayons réfléchis entre A et B comme indique sur la figure 1.7. Elle s'écrit :

$$\overline{BB_1} + \overline{BB_2} \equiv n\lambda \quad \Rightarrow \quad 2d \sin(\theta) = n\lambda; \quad n \in \mathbb{N} \quad (1.38)$$

Cette relation est dite la condition de réflexion de Bragg. Elle est valable aussi bien pour des photons (rayons X) que pour des électrons.

### d) Modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène

L'étude spectroscopique de l'atome d'hydrogène a révélé un spectre discontinu formé de plusieurs séries de raies : la série de Balmer formée de quatre raies observées dans le

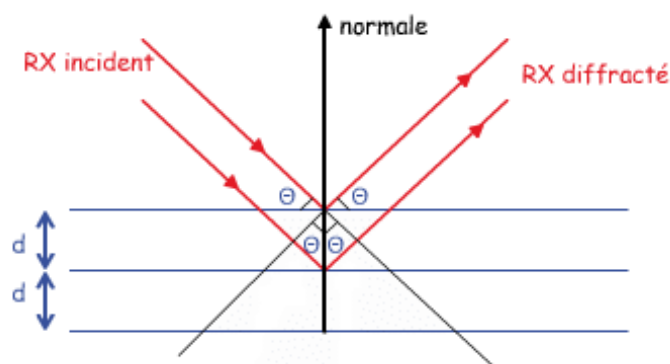


Figure 1.7: Schéma de diffraction des rayons X par des plans réticulaires successifs.

visible, la série de Lyman dans l'ultraviolet, la série de Paschen dans l'infrarouge et la série de Brackett dans l'infrarouge lointain. Les longueurs d'ondes des ces raies obéissent à la loi empirique de Rydberg :

$$\frac{1}{\lambda_{np}} = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad (1.39)$$

où  $n$  et  $p$  sont deux entiers naturels avec  $p \geq n + 1$ ; et  $R_H = 1.0967758 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$  est la constante de Rydberg.

En 1913, Niels Bohr élaborera un modèle de l'atome d'hydrogène à partir duquel il interprète l'existence des raies spectrales observées expérimentalement. Dans le modèle de Bohr, l'atome d'hydrogène est formé d'un électron en rotation autour du noyau supposé fixe (voir figure 1.8).

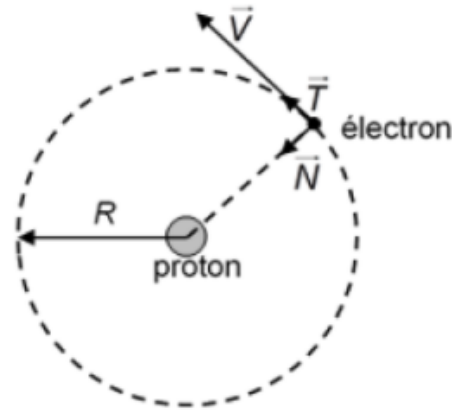


Figure 1.8: Atome d'H selon le modèle de Bohr.

Selon Bohr, l'électron est soumis de la part du proton à une force d'interaction électrostatique  $\vec{f}$  centripète, telle que :

$$\vec{f} = k \frac{e^2}{r^2} \vec{N} \equiv -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \vec{e}_r \quad (1.40)$$

par application du principe fondamental de la dynamique (PFD) à l'électron :

$$\vec{f} = m_e \vec{\gamma} = m_e \vec{\gamma}_N \equiv -m_e \frac{v^2}{r} \vec{e}_r \quad (1.41)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m_e \frac{v^2}{r} \quad (1.42)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} = m_e v^2 \quad (1.43)$$

$$\Rightarrow E_c = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1.44)$$

La force  $\vec{f}$  est conservative ( puisque le travail produit par cette force est indépendant du chemin suivi par son point d'action), et par suite elle dérive d'une énergie potentielle telle que :

$$f = -\frac{dE_p}{dr} \Rightarrow dE_p = -f dr \quad (1.45)$$

Intégrons cette relation pour  $r$  variant entre  $r$  et l'infini donne :

$$E_p(\infty) - E_p(r) = -\int_r^\infty f dr = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.46)$$

par convention

$$E_p(\infty) = 0 \quad \text{et donc} \quad E_p = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.47)$$

donc l'énergie mécanique

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (1.48)$$

*Remarque :*

L'énergie de l'atome est négative, et augmente avec le rayon de l'orbite (c'est-à-dire lorsque l'électron est excité). Quand  $r$  tend vers l'infini, l'énergie tend vers zéro : l'électron est libéré de l'attraction électrostatique exercée par le noyau (ionisation de l'atome).

Bohr a postulé que le moment cinétique de l'électron est quantifié, et seuls les orbites dont le moment cinétique  $\sigma$  est un multiple de  $\hbar$  sont permis.

En fait, comme le moment cinétique est défini par  $\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$  tel que  $\vec{p} = m_e \vec{v}$ , et d'autre part on a montré d'après équation [1.43] que  $v^2 = e^2/(4\pi\epsilon_0 m_e r)$ , il s'en déduit que le rayon  $r$  des différentes orbites s'exprime par :  $r_n = n^2 r_1$ , où  $r_1 = (h^2 \epsilon_0)/(\pi m_e e^2)$  est le rayon de la 1<sup>ère</sup> orbite de Bohr,  $r_1 \approx 52.9 \text{ pm}$  [parfois il s'exprime par  $r_0$ ].

L'insertion de la condition  $L = m_e v r = n\hbar$  (où  $n \in \mathbb{N}$ ) dans l'équation [1.48] permet d'écrire :

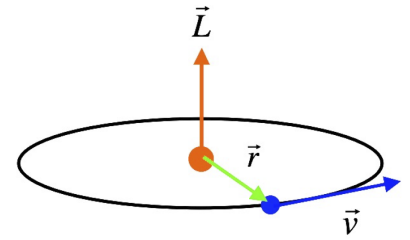
$$E = E_n = -\frac{E_1}{n^2} \quad (1.49)$$

où  $E_1 = (m_e e^4)/(8h^2 \epsilon_0^2) = 13.58 \text{ eV}$ , est l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

Le niveau le plus bas d'énergie est le niveau fondamental  $E_1$ . Les niveaux supérieurs  $E_2, E_3, E_4, \dots$  représentent les niveaux "excités". Lorsque l'électron chute d'un de ces niveaux supérieur  $E_p$  vers un niveau inférieur  $E_n$ , il émet la différence d'énergie correspondant à des photons de fréquence  $\nu_{np}$  :

$$h\nu_{np} = \frac{hc}{\lambda_{np}} = E_p - E_n = -\frac{E_1}{p^2} + \frac{E_1}{n^2} = E_1 \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad (1.50)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\lambda_{np}} = \frac{E_1}{hc} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) = R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{p^2} \right) \quad (1.51)$$



où  $R_H = 1.09737 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ , est la constante de Rydberg. Cette valeur est en excellent accord avec la valeur expérimentale  $1.0967758 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ .

*Spectre de l'atome d'hydrogène :*

Bohr a pu aussi déterminer les fréquences des spectres d'absorption ou d'émission de l'atome d'hydrogène avec un excellent accord avec les valeurs théoriques et expérimentales [figure 1.9]

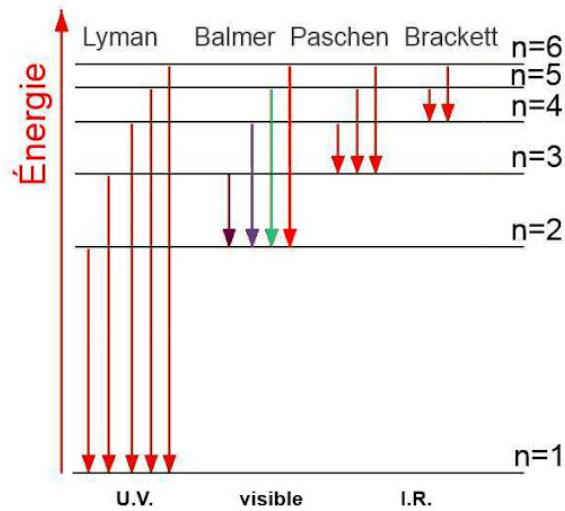


Figure 1.9: Spectre d'émission de l'atome d'hydrogène.



# 2. Méca. Ondulatoire - Éq. de Schrödinger



Le présent est la seule chose qui n'a pas de fin.

— Erwin Schrödinger

## 2.1 Hypothèses fondamentales

### 2.1.1 Fonction d'onde

Dans les considérations du chapitre 1, nous avons conclu que les concepts d'ondes et de corpuscule sont deux approximations (valables à l'échelle macroscopique) incompatibles entre elles de la nature des constituants de la matière. Nous avons formulé ce comportement grâce aux formules de Planck-Einstein et de Dr Broglie.

#### Postulat

Tout processus quantique est décrit par une fonction complexe  $\psi(\vec{r}, t)$  appelée fonction d'onde qui est une amplitude de probabilité de présence de la particule. Cette fonction d'onde contient toutes les informations sur l'état de la particule (ou du processus étudié).

Max Born a postulé en 1924 que la probabilité pour que la particule soit trouvée à l'instant  $t$  dans un élément de volume infinitésimal  $dv = dx dy dz$  centre autour du point  $M$  de coordonnées  $x, y$  et  $z$  est :

$$dp(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 dv \quad [2.1]$$

où  $|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t)^* \psi(\vec{r}, t)$  est une densité de probabilité.

Si le système est constitué d'une seule particule, la probabilité de trouver celle-ci à un point quelconque dans l'espace à l'instant  $t$  est une certitude, donc par convention, égale à l'unité :

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dv = 1 \quad [2.2]$$



Pour représenter un état physique, la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  doit être de “*carre sommable*”; c'est-à-dire une fonction dont l'intégrale  $\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 dv$  converge.

### 2.1.2 Différence fondamentale entre état classique et état quantique

État classique d'un corpuscule est parfaitement déterminé à l'instant  $t$  par la connaissance des 6 composantes  $x, y, z, v_x, v_y$  et  $v_z$ . Le principe fondamental de la mécanique classique  $\vec{F} = d\vec{p}/dt$ , régit l'évolution du système à chaque instant. Ce principe établi par Newton n'a pas été démontré mais admis. Il a justifié à posteriori par ses conséquences.

État quantique d'une particule nécessite pour être parfaitement déterminé, la connaissance des valeurs numériques de  $\psi(\vec{r}, t)$  aux différents points de l'espace. Schrödinger en 1926 établit l'équation d'évolution à laquelle obéit la fonction  $\psi(\vec{r}, t)$ . Il ne saurait être question dans le cadre de ce cours de la déduire d'un postulat d'évolution, aussi, plutôt que de l'obtenir d'une manière qui ne pourrait être qu'apparemment déductive, il est préférable de simplement la poser et de l'admettre comme étant **l'équation fondamentale de la dynamique quantique**.

## 2.2 Équation de Schrödinger

### 2.2.1 Introduction

Lorsqu'une particule de masse  $m$  se trouve dans un champ de force extérieur dérivant d'un potentiel, en plus de son énergie cinétique, elle possède une énergie potentielle, fonction du point et en general du temps. On notera  $V(\vec{r}, t)$  cette énergie potentielle qu'on nommera **potentiel**. Dans la suite de ce cours, on la considérera comme indépendante du temps ce est largement suffisante pour traiter les quelques exemples simples auxquelles nous nous limiterons ultérieurement.

État de cette particule (ou de tout système quantique qui peut être ramené à l'étude d'une particule) sera représenté par la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  solution de **l'équation de Schrödinger** :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \quad [2.3]$$

où le symbole  $\Delta = (\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2)$  représente l'opérateur Laplacien.

Remarques : l'équation de Schrödinger est :

- linéaire et homogène en  $\psi(\vec{r}, t)$ . Par conséquent elle prend en compte le principe de superposition [les solutions peuvent être ajoutées en amplitude et en phase pour pouvoir reproduire le phénomène d'interférence]. Autrement dit, Si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont deux solutions indépendantes, alors toute combinaison linéaire  $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$  [ $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ] est aussi solution. Ceci permet de construire la solution générale en formant des combinaisons linéaires de solutions particulières.

- du premier degré par rapport au temps. Cette condition est nécessaire pour que l'état du système représenté par  $\psi(\vec{r}, t_0)$  à l'instant  $t_0$  détermine son état à tout instant ultérieur  $t$ .
- L'équation de Schrödinger précédente permet d'obtenir les relations de correspondance entre grandeurs physiques classiques et opérateurs différentielles quantiques. En effet, en écrivant que l'énergie totale est la somme de l'énergie cinétique et l'énergie potentielle :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \quad [2.4]$$

En comparant avec l'équation de Schrödinger, on obtient :

$$E \longleftrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad [2.5]$$

$$p^2 \longleftrightarrow -\hbar^2 \Delta = (-i\hbar \vec{\nabla})^2 \quad [2.6]$$

$$\vec{p} \longleftrightarrow -i\hbar \vec{\nabla} = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad [2.7]$$

### Densité et courant de probabilité :

Déjà vu que la fonction d'onde,  $\psi(\vec{r}, t)$ , n'a pas de réalité physique d'après Born, mais elle peut être interprétée comme une onde de probabilité de présence. Dans ce sens, et afin que cette interprétation probabiliste soit compatible avec l'équation de Schrödinger, il doit exister une équation de conservation décrivant l'écoulement sans perte du flux de probabilité.

- Densité de probabilité :

$$\rho(\vec{r}, t) = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) \quad [2.8]$$

- Courant de probabilité :

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \left[ \psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t) \right] \quad [2.9]$$

- Équation de conservation : L'équation de conservation satisfaite par  $\rho(\vec{r}, t)$  et  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  est (voir section 1.4 de l'annexe 1 pour plus de détails):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad [2.10]$$

Elle reflète que toute variation dans le temps de  $\rho(\vec{r}, t)$  est due en fait à une variation dans l'espace du courant de probabilité  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ . Par conséquent, c'est une équation de bilan qui traduit la conservation locale de la densité de probabilité, décrivant l'écoulement sans création ni perte du flux de probabilité.

### 2.2.2 Séparation des variables et états stationnaires

Nous cherchons des solutions de l'équation de Schrödinger du type  $\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})\chi(t)$ . Pour cela reportons cette solution éventuelle dans l'équation [2.3] ce qui donne :

$$i\hbar\phi(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}\chi(t) = \chi(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r})\right] + \chi(t)V(\vec{r})\phi(\vec{r}) \quad [2.11]$$

Divisons les deux membres par  $\phi(\vec{r})\chi(t)$  :

$$\frac{i\hbar}{\chi(t)}\frac{d}{dt}\chi(t) = \frac{1}{\phi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r})\right] + V(\vec{r}) \quad [2.12]$$

Nous avons donc une égalité entre une fonction de  $t$  seul à gauche et une fonction de  $\vec{r}$  seul à droite. L'égalité n'est possible que si chacune de ces fonctions est égale à une constante que nous appellerons  $E = \hbar\omega$  [ $\omega$  est une pulsation]. Nous obtenons ainsi les deux équations suivantes :

$$\frac{d\chi(t)}{dt} = -i\omega\chi(t) \Rightarrow \chi(t) = Ae^{-i\omega t} \quad [2.13]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \quad [2.14]$$

L'équation [2.14] est l'**équation de Schrödinger indépendante du temps**.  $\phi(\vec{r})$  est appelée **solution stationnaire** de l'équation de Schrödinger.

Remarques :

- La solution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit:

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r})\chi(t) = Ae^{-i\omega t}\phi(\vec{r}) \Rightarrow |\psi(\vec{r}, t)|^2 = |A\phi(\vec{r})|^2 \quad [2.15]$$

la densité de probabilité est indépendante du temps  $t$ . Cela signifie que la particule est stationnaire, en ce sens que sa probabilité de présence (équation [2.1]) en n'importe quel point  $M$  de l'espace est invariable dans le temps.

- L'opérateur Hamiltonien  $H$  du système s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \quad [2.16]$$

et donc l'équation [2.14] peut encore être écrite sous la forme d'une équation aux valeurs propres :

$$H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \quad [2.17]$$

ce qui reflète que les énergies possibles du système sont donc les valeurs propres de l'hamiltonien  $H$ .

- Équation de Schrödinger à une seule dimension est obtenue en remplaçant le laplacien  $\Delta$  par son expression à une seule dimension  $\frac{d^2}{dx^2}$  dans l'équation [2.14] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x) \quad [2.18]$$

qui se simplifie encore une fois sous forme :

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))\phi(x) = 0 \quad [2.19]$$

### 2.2.3 Comportement de la fonction d'onde stationnaire à une seule dimension $\phi(x)$

Pour qu'une fonction d'onde  $\phi(x)$  soit acceptable comme fonction propre, c'est-à-dire solution de l'équation de Schrödinger, elle doit posséder certaines propriétés de continuité. Comme  $|\phi(x)|^2 = \phi(x)\phi(x)^*$  représente la densité de probabilité au point  $x$ ,  $\phi(x)$  doit être nécessairement continue en tout point. En effet, la densité de probabilité pour  $x + \epsilon$  doit tendre vers la valeur de cette densité pour  $x$  quand  $\epsilon$  tend vers 0.

#### a) Région où l'énergie potentielle est constante :

Si  $V(x) = V = \text{Constante}$ , l'équation de Schrödinger indépendante du temps [2.19] s'écrit :

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\phi(x) = 0 \quad [2.20]$$

Plusieurs cas se présentent suivant la valeur de l'énergie  $E$ .

**Si  $E > V$**  : la quantité  $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$  est positive, nous la posons égale à  $k^2$  [ $k^2 = 2m(E - V)/\hbar^2$ ]. La solution de l'équation de Schrödinger est alors :

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad [2.21]$$

où  $A$  et  $A'$  sont des constantes complexes.

**Si  $E < V$**  : la quantité  $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$  est négative, nous la posons égale à  $-q^2$  [ $q^2 = 2m(V - E)/\hbar^2$ ]. La solution de l'équation de Schrödinger est alors :

$$\phi(x) = Be^{qx} + B'e^{-qx} \quad [2.22]$$

où  $B$  et  $B'$  sont des constantes complexes.

**Si  $E = V$**  : la quantité  $\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$  est nulle, l'équation différentielle de second degré est assez-simple. L'équation de Schrödinger admet comme solution :

$$\phi(x) = Cx + C' \quad [2.23]$$

où  $C$  et  $C'$  sont des constantes complexes.

**b) comportement de  $\phi(x)$  en un point où l'énergie potentielle est discontinu :**

Si le potentiel  $V(x)$  est fini et discontinu en un point  $x_0$ , d'après la relation (2.20), la dérivée seconde  $\frac{d^2}{dx^2}\phi(x)$  l'est aussi. On peut alors en déduire que :

$$\begin{aligned} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \phi''(x) dx &= \phi'(x_0 + \epsilon) - \phi'(x_0 - \epsilon) = 2\epsilon \overline{\phi''(x_0)} \\ &= 2\epsilon \left( \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \overline{\phi} \right) = A\epsilon \end{aligned} \quad [2.24]$$

où  $A$  est une constante finie.

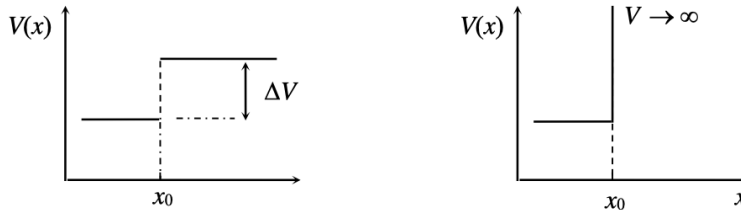


Figure 2.1: Discontinuité finie [gauche] et infinie [droite].

Il s'ensuit que :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi'(x_0 + \epsilon) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \phi'(x_0 - \epsilon) \quad [2.25]$$

ceci implique que la dérivée première  $\phi'(x) = \frac{d}{dx}\phi(x)$  de  $\phi(x)$  est continue en  $x_0$ . Il en sera de même de la fonction  $\phi(x)$ .

Si le potentiel  $V(x)$  est infini en un point  $x_0$ , d'après la relation (2.20), la dérivée seconde  $d^2\phi(x)/dx^2$  est infinie, et la dérivée première  $\phi'(x)$  est discontinue en  $x_0$ . Seule la fonction d'onde  $\phi(x)$  est dans ce cas continue.

**c) théorèmes :**

On admet que la fonction d'onde  $\phi(x)$  est toujours continue quelque soit la discontinuité du potentiel et est infiniment dérivable.

**Théorème 1 :**

Aux points de discontinuité finie du potentiel  $V(x)$ , la fonction d'onde stationnaire  $\phi(x)$  et sa dérivée première sont continues.

**Théorème 2 :**

Sur une paroi parfaitement réfléchissante ( $V \rightarrow \infty$  dans la région  $x > x_0$ ), la fonction d'onde stationnaire  $\phi(x)$  s'annule c'est-à-dire que la probabilité de présence de la particule est nulle dans une région où  $V \rightarrow \infty$ .

**Théorème 3 :**

Aux points de discontinuité infinie du potentiel  $V(x)$ , la fonction d'onde stationnaire  $\phi(x)$  est continue alors que sa dérivée première est discontinue.

**Théorème 4 :**

Si le potentiel  $V(x)$  est pair, alors les fonctions d'onde stationnaires  $\phi(x)$  ont une parité bien définie : elles sont paires ou impaires.

**2.2.4 Étude d'une marche de potentiel**

La marche de potentiel permet de décrire divers systèmes physiques en première approximation : la situation d'un électron de conduction dans un métal par exemple. Dans le métal, on peut considérer, que les électrons de conduction sont mis en commun et constituent un gaz d'électrons susceptibles de se déplacer librement. Ces électrons rencontrent à la surface du métal une brutale augmentation du potentiel, ils ne peuvent s'échapper et restent piégés dans le métal car il ne possèdent pas une énergie cinétique suffisante pour vaincre la barrière. Le potentiel qui illustre schématiquement ce cas physique est présenté par la figure [2.2-b] pour des électrons, à la limite où leurs longueurs d'onde de de Broglie sont très supérieures à  $a$ . Afin de simplifier les calculs, on considère que le potentiel peut être schématisé par une marche de potentiel représentée par la figure [2.2-a].

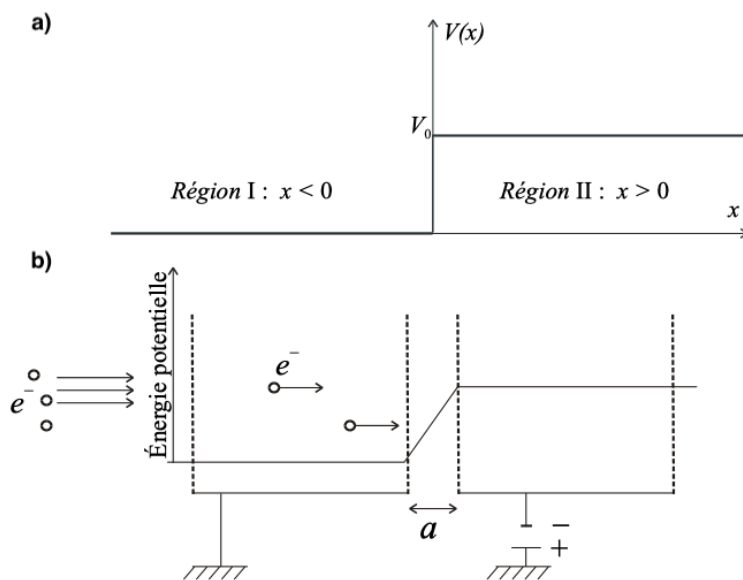


Figure 2.2: Discontinuité finie (gauche) et infinie (droite).

a-) cas où  $E > V_0$  :  
on pose :

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad k_2^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \quad [2.26]$$

dans la région I, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\phi(x) = 0 \quad [2.27]$$

dont la solution est

$$\phi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad [2.28]$$

$\phi_1(x)$  est la superposition de deux ondes; la première :  $\phi_1^i(x) = A_1 e^{ik_1 x}$ , correspond à une particule se déplaçant de gauche à droite, représente une onde incidente issue de la région I dont le courant est  $|A_1|^2(\hbar k_1/m)$ , il est positif. Cette onde donne naissance, dans la région I, à l'onde  $\phi_1^r(x) = A_1' e^{-ik_1 x}$ , réfléchiée en  $x = 0$  qui correspond à une particule se déplaçant de droite vers la gauche. Le courant correspondant se dirige vers les  $x$  négatifs, il vaut  $-|A_1'|^2(\hbar k_1/m)$ .

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

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\phi(x) = 0 \quad [2.29]$$

dont la solution est

$$\phi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad [2.30]$$

À son tour  $\phi_2(x)$  est la superposition de deux ondes; la première :  $\phi_2^t(x) = A_2 e^{ik_2 x}$ , correspond à une onde transmise dans la région II dont le courant est positif et s'écrit par  $|A_2|^2(\hbar k_2/m)$ , tandis que l'onde  $\phi_2^r(x) = A_2' e^{-ik_2 x}$  représente la partie qui subit la réflexion dans la région II, mais puisque il n'y a pas de réflexion dans cette région (physiquement parlant), on prend  $A_2' = 0$ .

Exemple :

Soit un flux de particules se déplaçant de gauche à droite (vers les  $x$  croissants). Il est certain que la fonction d'onde de la particule dans la région II doit être de la forme  $e^{ik_2 x}$ , onde plane se déplaçant vers la droite ( $x > 0$  et puisque il n'y a pas de particules provenant de la droite [pas de réflexion dans la région II]) on doit prendre  $A_2' = 0$ .

Les conditions de raccordement au point limite  $x = 0$  sont :

$$\begin{aligned} \phi_1(0) = \phi_2(0) &\Rightarrow A_1 + A_1' = A_2 \\ \phi_1'(0) = \phi_2'(0) &\Rightarrow k_1(A_1 - A_1') = k_2 A_2 \end{aligned} \quad [2.31]$$

d'où

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad \text{et} \quad T = \left| \frac{A_2}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad [2.32]$$

Les coefficients  $R$  et  $T$  sont les "coefficients de réflexion et de transmission en amplitude".

*Remarque :*

D'après la relation [2.32],  $A_1'$  est non nul, ce qui implique l'existence d'une probabilité non nulle pour que la particule soit réfléchiée en  $x = 0$ . En plus, on remarque que  $R + T = 1$ , cela signifie que le nombre  $k$  de particules reste constant : il n'y a pas de particules qui disparaissent ni des particules qui apparaissent en  $x = 0$ , car toutes les particules qui y parviennent en repartant : il y a conservation du nombre de particules. La situation

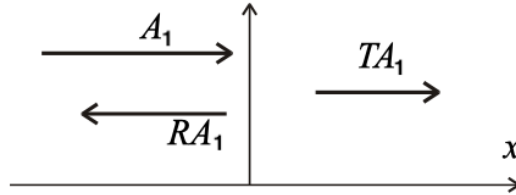


Figure 2.3: Réflexion et de transmission en  $x = 0$ .

est différente en mécanique classique; en effet, la particule possède l'énergie cinétique  $E$  dans la région I. Cette énergie cinétique est suffisante pour que la particule passe dans la région II où l'énergie cinétique de la particule est  $E - V_0 > 0$ . Du coup, un ralentissement lorsque le corpuscule entre dans la région II est prévu mais aucune particule n'est réfléchiée en  $x = 0$ . Le phénomène de réflexion est donc un phénomène typiquement ondulatoire.

b-) cas où  $0 < E < V_0$  :

On pose :

$$\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) = -k_2^2 \quad \Rightarrow \quad i\rho = k_2 \quad [2.33]$$

on obtient

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} && \text{(région I)} \\ \phi_2(x) &= A_2 e^{\rho x} + A_2' e^{-\rho x} && \text{(région II)} \end{aligned} \quad [2.34]$$

or la densité de probabilité de trouver la particule à l'infini ( $x \rightarrow +\infty$ ) ne peut être infinie (inacceptable physiquement car la fonction d'onde doit être bornée); il est donc nécessaire de prendre  $A_2 = 0$ . Le système [2.34] devient :

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} && \text{(région I)} \\ \phi_2(x) &= A_2' e^{-\rho x} && \text{(région II)} \end{aligned}$$

La fonction d'onde est continue en  $x = 0$  ainsi que sa dérivée première, cela permet d'obtenir :

$$\frac{A_1'}{A_1} = \frac{k_1 - i\rho}{k_1 + i\rho} \quad \text{et} \quad \frac{A_2'}{A_1} = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho} \quad [2.35]$$

le coefficient de réflexion est alors :

$$R = \left| \frac{A_1'}{A_1} \right|^2 = 1 \quad [2.36]$$



Interprétation physique :

Comme auparavant, la fonction d'onde dans la région I est la superposition de deux ondes :  $\phi_1^i(x) = A_1 e^{ik_1 x}$  et  $\phi_1^r(x) = A_1' e^{-ik_1 x}$ . L'onde  $\phi_1^i(x)$  décrit un flux de particules de courant positif  $|A_1|^2 (\hbar k_1 / m)$ , venues de la région  $x = -\infty$  et se dirigeant vers la marche de potentiel. Une telle onde représente l'onde "incidente". L'onde  $\phi_1^r(x)$  représente un flux de particules de courant  $-|A_1'|^2 (\hbar k_1 / m)$  négatif et se dirigeant donc vers la région  $x = -\infty$ , l'onde  $\phi_1^r(x)$  est donc l'onde "réfléchie".

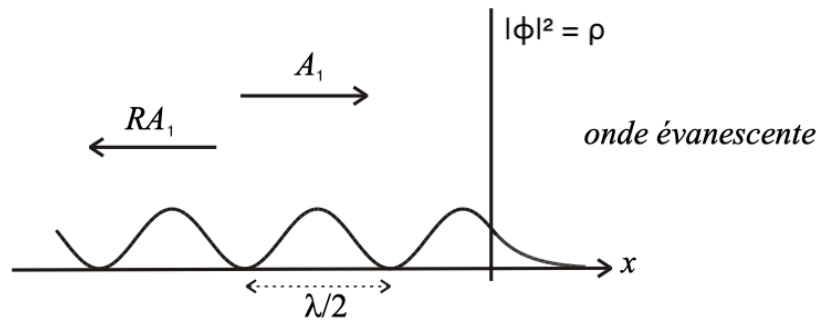


Figure 2.4: Réflexion en  $x = 0$  et l'onde évanescente pour  $x > 0$ .

Comme en mécanique classique, le coefficient de réflexion en amplitude  $R = 1$ . L'onde subit donc une réflexion totale dans la mesure où toute particule incidente est réfléchie. Les ondes incidente et réfléchie construisent une figure d'interférences dans la région I. La densité de présence dans telle région est donc  $\rho_i = |\phi_1^i(x)|^2$ . En posant  $R = |R|e^{i\theta}$ , il vient alors que  $\rho_i = 2(1 + \cos(2k_1 x - \theta))$ . La réflexion étant totale, le minimum de  $\rho_i$  correspond à une frange noire. Dans la région I on observe donc une alternance de franges brillantes et de franges noires dont l'interfrange est  $\lambda/2 = \pi/k_1$ .

Cependant, il existe maintenant une fonction d'onde dans la région II :  $A_2' e^{-\rho x}$ , onde évanescente, qui implique une probabilité non nulle de trouver la particule dans la région II qui lui est interdite en physique classique. Cette probabilité décroît exponentiellement avec  $x$ .

Remarque :

Dans la théorie classique, aucune particule ne peut passer dans la région II si son énergie cinétique dans la région I est inférieure à  $V_0$  (soit  $E < V_0$ ). Ici la situation est différente et ressemble à la situation que l'on rencontre en optique où le mécanisme de réflexion totale sur un dioptre engendre une onde évanescente dans le milieu le plus réfringent.

Schéma explicatif :

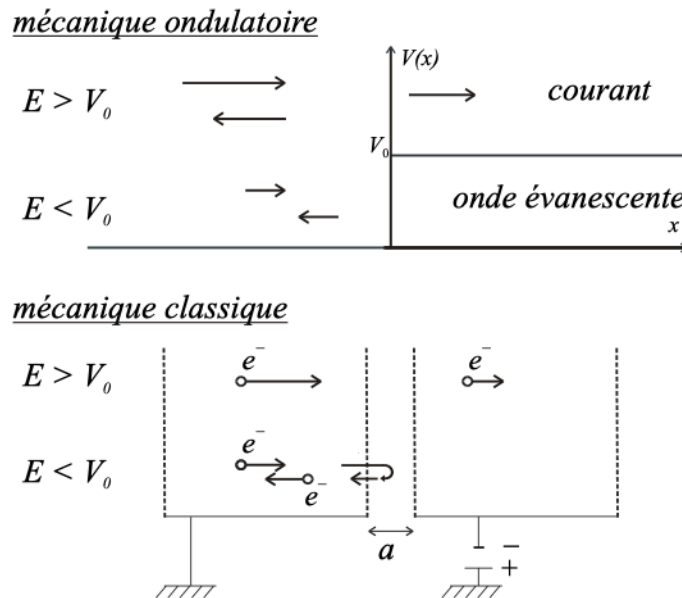


Figure 2.5: Marche de potentiel entre la mécanique classique et quantique.

### 2.2.5 Étude d'une barrière de potentiel

Considérons une particule à une dimension de masse  $m$  soumise à l'énergie potentielle,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a \\ V_0 & \text{si } |x| < a \end{cases} \quad (\text{avec } V_0 > 0),$$

schématisée sur la figure [2.6]. Tel potentiel, discontinu en deux points  $x = -a$  et  $x = a$ , permet d'étudier le principe de la résonance de diffusion ainsi que les phénomènes liés à l'effet Tunnel.

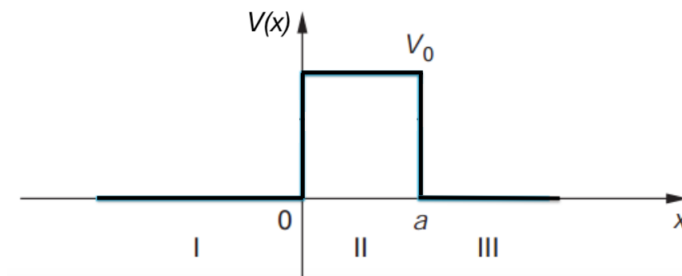


Figure 2.6: Barrière de potentiel.

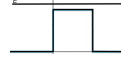
Les fonctions propres de l'énergies satisfont l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \text{pour } x < 0 \text{ et } x > a \quad [2.37]$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad \text{pour } 0 < x < a. \quad [2.38]$$

Nous distinguons alors les deux cas  $E > V_0$  et  $E < V_0$ .

a-) Le cas où  $E > V_0$  : *Résonance de diffusion*



avec les mêmes notations qu'au paragraphe 2.2.4, les fonctions d'onde relatives aux trois régions sont :

$$\begin{aligned} x < 0 : \quad \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{avec} \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \\ 0 < x < a : \quad \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \quad \text{avec} \quad k_2 = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar \\ x > a : \quad \psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad \text{avec} \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \quad \text{et} \quad A'_3 = 0 \end{aligned}$$

Le choix de  $A'_3 = 0$  dans la dernière ligne est justifié physiquement par l'absence de réflexion dans la région II.

La fonction ainsi définie est bornée. Nous devons nous assurer de sa continuité et de celle de sa dérivée. Ainsi, les conditions de raccordement imposent  $\psi_1(0) = \psi_2(0)$  [continuité en  $x = 0$ ] et  $\psi_2(a) = \psi_3(a)$  [continuité en  $x = +a$ ] :

$$A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \quad [2.39]$$

$$A_2 e^{+ik_2 a} + A'_2 e^{-ik_2 a} = A_3 e^{+ik_1 a} \quad [2.40]$$

La continuité de la dérivée première impose  $\left. \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{d\psi_2}{dx} \right]_{x=0}$  et  $\left. \frac{d\psi_2}{dx} = \frac{d\psi_3}{dx} \right]_{x=+a}$  :

$$k_1(A_1 - A'_1) = k_2(A_2 - A'_2) \quad [2.41]$$

$$k_2(A_2 e^{+ik_2 a} - A'_2 e^{-ik_2 a}) = k_1 A_3 e^{+ik_1 a} \quad [2.42]$$

Les cinq constantes d'intégration  $A_1$ ,  $A'_1$ ,  $A_2$ ,  $A'_2$  et  $A_3$  sont reliées entre elles par 4 équations. Afin de les simplifier, on écrit :

$$(2.40) \times k_2 + (2.42) \longrightarrow A_2 = \frac{k_1 + k_2}{2k_2} e^{i(k_1 - k_2)a} A_3 \quad [2.43]$$

et

$$-(2.40) \times k_2 + (2.42) \longrightarrow A'_2 = \frac{k_2 - k_1}{2k_2} e^{i(k_1 + k_2)a} A_3 \quad [2.44]$$

insérons ces deux équations [2.43] et [2.44] dans les équations [2.39] et [2.41] permet d'obtenir :

$$\frac{A'_1}{A_1} = \frac{(k_2^2 - k_1^2) \sin(k_2 a)}{(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 a) - 2ik_1 k_2 \cos(k_2 a)} \quad [2.45]$$

et

$$\frac{A_3}{A_1} = \frac{2ik_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1^2 + k_2^2) \sin(k_2 a) + 2ik_1 k_2 \cos(k_2 a)} \quad [2.46]$$

Les coefficients de réflexion et transmission de la barrière sont respectivement :

$$R = \left| \frac{A'_1}{A_1} \right|^2 = \frac{(k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_2 a)}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a) + 4k_1^2 k_2^2 \cos^2(k_2 a)} \quad [2.47]$$

et

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a) + 4k_1^2 k_2^2 \cos^2(k_2 a)} \quad [2.48]$$

On remarque que  $(k_1^2 + k_2^2)^2 \sin^2(k_2 a) + 4k_1^2 k_2^2 \cos^2(k_2 a) = (k_2^2 - k_1^2)^2 \sin^2(k_2 a) + 4k_1^2 k_2^2$  ce qui permet de bien vérifier que  $R + T = 1$ .

*Interpretation physique :*

La fonction d'onde  $\psi_1(x)$  se décompose en deux parties : l'onde  $\psi_1^i(x) = A_1 e^{ik_1 x}$  représente l'onde incidente, issue de la région I. Cette onde, en point  $x = 0$ , est partiellement réfléchi (la partie réfléchi est représentée par  $\psi_1^r(x) = A_1' e^{-ik_1 x}$ ) et partiellement transmise (la partie transmise lors du passage I→II est représentée par  $\psi_1^t(x) = A_2 e^{ik_2 x}$ ). La scène se répète dans la région II. En fait,  $\psi_2^i(x) = \psi_1^t(x) = A_2 e^{ik_2 x}$  représente l'onde incidente dans cette région, tandis que  $\psi_2^r(x) = A_2' e^{-ik_2 x}$  est l'onde réfléchi en point  $x = a$ . Finalement, l'onde transmise par la barrière en point  $x = a$  est  $\psi_3(x) = \psi_3^i(x) = A_3 e^{ik_1 x}$ .

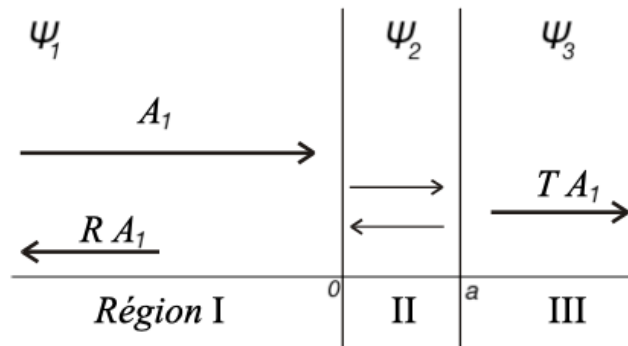


Figure 2.7: Barrière de potentiel dans le cas où  $E > 0$ .

Le flux incident dans la région I est  $|A_1|^2 (\hbar k_1/m)$ , celui transmis dans la région III est  $|A_3|^2 (\hbar k_1/m)$ . Le coefficient de transmission en intensité est le rapport de ces deux flux comme déjà mentionné dans équation [2.46], il vaut  $T$ . De même le coefficient de réflexion en intensité vaut  $R$ . La relation précédente  $R + T = 1$  assure la conservation du nombre de particules : le nombre de particules qui pénètrent dans la barrière est égal aux nombre de particules qui en sortent pendant le même temps.

*Étude énergétique et graphique*

En remplaçant  $k_1$  et  $k_2$  par leurs expressions en fonction de  $E$  et  $V_0$ , on obtient :

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left( \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} a \right)} \quad [2.49]$$

$E$  et  $V_0$  étant constants, on peut étudier les variations de  $T$  en fonction de la largeur de la barrière  $a$ . En effet,

- $T$  est minimal  $\Leftrightarrow \sin(k_2 a) = \pm 1$ . Et par conséquent, la valeur de  $a$  peut s'écrire comme  $a = n\pi/(2k_2)$  où  $n \in \mathbb{N}^*$ .

$$T_{min} = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2} \quad [2.50]$$

- $T$  est maximal et égal à 1  $\Leftrightarrow \sin(k_2 a) = 0$ . Et donc,  $a = n\pi/k_2$  où  $n \in \mathbb{N}$ . On dit alors qu'on a une résonance de diffusion [la particule est intégralement transmise et  $R = 0$ ].

La figure [2.8] illustre la variation de  $T$  en fonction des valeurs de la largeur de la barrière  $a$ .

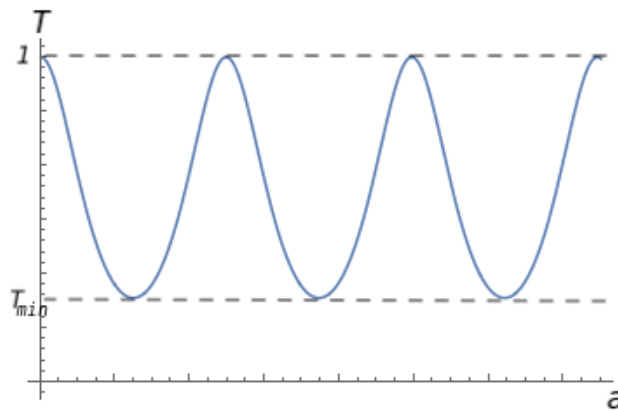
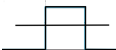


Figure 2.8: Variation de  $T$  en fonction de  $a$ .

b-) Le cas où  $0 < E < V_0$  : Effet Tunnel 

La résolution de l'équation de Schrödinger dans les différentes régions nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} x < 0 : \quad \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{avec} \quad k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \\ 0 < x < a : \quad \psi_2(x) &= A_2 e^{\rho x} + A'_2 e^{-\rho x} \quad \text{avec} \quad \rho = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar = ik_2 \\ x > a : \quad \psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad \text{avec} \quad A'_3 = 0 \end{aligned}$$

l'expression du coefficient de transmission  $T$  s'obtient en remplaçant  $k_2$  dans l'expression [2.48] par  $-i\rho$ . Ainsi nous trouvons :

$$T = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2 \left( \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} a \right)} \quad [2.51]$$

pour ce faire, il suffit de remarquer que  $\sin(-i\rho a) = -i \sinh(\rho a)$ . Et donc

$$R = 1 - T \quad [2.52]$$

*Interpretation physique :*

Classiquement parlant, comme l'énergie cinétique des particules dans la région I est  $E$ , cette valeur est insuffisante pour que les particules issues de la région I passent dans la région II où leur énergie potentielle est  $V_0$ , supérieure à  $E$ . Les particules sont toutes réfléchies. Dans le cadre de la mécanique quantique, la situation est totalement différente, les particules ont une probabilité non nulle (puisque le coefficient de transmission  $T \neq 0$ ) de traverser la barrière de potentiel par effet tunnel.

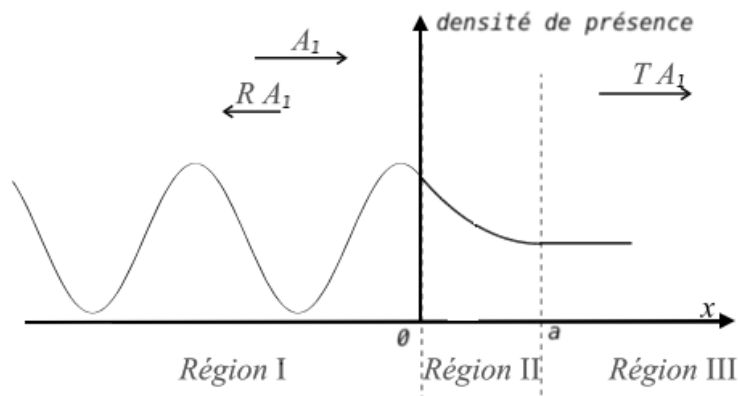


Figure 2.9: Densité de présence de la particule décrite par la fonction d'onde  $\psi$ .

*Dénomination et Remarques :*

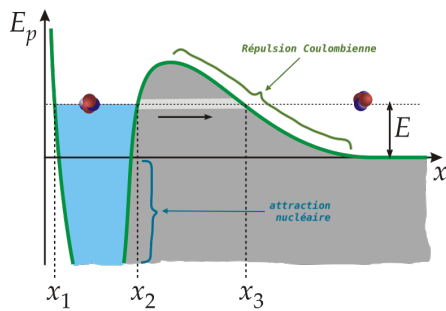
◦ Imaginons un véhicule passe un col de montagne sur son élan, il faut qu'il possède, au pied de la montagne, une énergie cinétique,  $E$ , supérieure (ou égale) à l'énergie potentielle,  $V_0$ , qu'il aura au sommet du col. À cette seule condition le véhicule pourra passer sur l'autre versant de la montagne. Si ce n'est pas le cas (pour  $E < V_0$ ), le véhicule peut atteindre l'autre versant de la montagne en empruntant un tunnel.

◦ Dans l'équation [2.51] si  $\rho a \gg 1 \rightarrow T \approx \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} e^{-2\rho a} \rightarrow 0$ . On retrouve le résultat obtenu pour la marche de potentiel.

◦ Effet tunnel a de nombreuses applications :

i) Désintégration  $\alpha$  des noyaux atomiques

Les particules  $\alpha$  (porteuses des rayonnement sensible aux champs électriques et magnétiques), sont les particules émises par certains atomes, surtout les atomes lourds (ceux dont le nombre atomique est grand). Une particule  $\alpha$  possède une énergie potentielle qui est la somme de l'énergie potentielle nucléaire et de l'énergie potentielle liée à la répulsion entre protons.



Pour simplifier, le potentiel nucléaire est constant dans le noyau, et nul à l'extérieur. Le potentiel électrostatique diminue avec la distance à l'extérieur du noyau et est complètement supplanté par la force nucléaire dans le noyau. Le potentiel ressemble donc à ce qui est indiqué dans le schéma ci-contre : il forme une sorte de puits, entouré par une barrière de potentiel.

Donc d'un point de vue purement classique, le phénomène de désintégration  ${}^A_Z X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2} Y + {}^4_2 He$  ne peut avoir lieu et l'élément  ${}^A_Z X$  devrait rester stable, et pourtant l'expérience montre l'inverse. Grâce au physicien russe Georges GAMOV qui a montré en 1928 que ce même l'énergie de la particule  $\alpha$  reste inférieure devant la hauteur de la barrière, son passage à l'extérieur découlait d'un effet purement quantique : l'effet tunnel. Et pour ce faire, il fallait que l'énergie  $E$  doit être positive pour espérer franchir la barrière, sinon elle se heurte à une barrière infiniment épaisse. Et donc plus l'énergie est importante, moins cette barrière sera épaisse et plus la probabilité de franchissement sera importante.

### ii) Émission froide d'électrons

L'émission froide traduit l'extraction d'électrons libres d'un métal, ce qui peut donc donner lieu à l'apparition d'une différence de potentiel [d.d.p].

Le passage d'un électron libre d'un métal à l'espace extérieur est difficile puisqu'il demande une certaine quantité d'énergie appelée la fonction de travail  $W$  qui représente la barrière de potentiel estimée expérimentalement en se servant de l'équation d'Einstein :

$$W = h\nu - \frac{1}{2}m_e v_e^2 \quad (2.53)$$

où  $\nu$  représente la fréquence du photon  $\gamma$  utilisé, tandis que  $m_e$  et  $v_e$  sont, respectivement, la masse et la vitesse de l'électron éjecté par un effet photoélectrique.

D'un autre côté, le gaz d'électron libre à l'intérieur du métal est confiné dans un puits de potentiel dans lequel l'énergie potentielle des électrons est  $V \approx 0$ , tandis qu'à l'extérieur elle est considérablement plus grande ( $V_0 \gg 0$ ). Pour extraire un électron du métal il faut lui communiquer une énergie au moins égale à l'énergie d'extraction  $W$ , donnée par :

$$W = V_0 - E_{\max} \quad (2.54)$$

où  $E_{\max}$  est l'énergie du plus haut niveau occupé, comme indiqué dans la figure [2.10-a]) En élevant la température, l'énergie cinétique des électrons pourrait être augmentée. Par conséquent, une fraction d'électrons peut acquérir une énergie plus élevée que la barrière de potentiel  $W$ , il en résulte un courant électrique du métal, cela est connu comme étant l'émission thermoionique d'électrons qui est largement exploitée pour obtenir des rayons électroniques dans les tubes à décharges.

Cependant, à de plus basses températures, un courant peut s'établir par l'action d'un champ électrique extérieur d'intensité  $\mathcal{E}$  appliqué le long de la surface du métal. Dans ce cas, l'énergie potentielle d'un électron de charge  $e$  est donnée en fonction de la distance

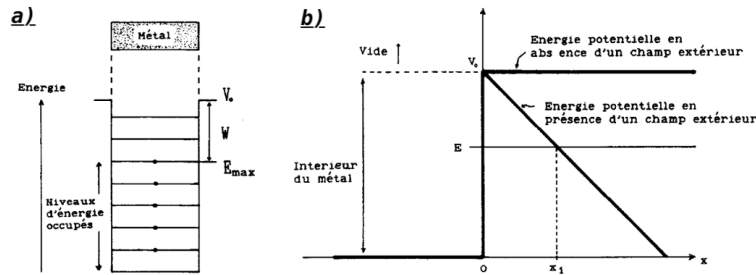


Figure 2.10

$x$  de la surface du métal par :

$$V(x) = V_0 - e \mathcal{E} x \quad (2.55)$$

La figure [2.10-b]) montre la barrière de potentiel formée due au champ électrique extérieur. Les électrons peuvent traverser cette barrière par un effet tunnel.

*Remarques :*

Il y a d'autres exemples physiques où l'effet photo-électrique intervient (voir l'annexe 1.4). Tels exemples comprennent, mais sans s'y limiter : Inversion de la molécule d'ammoniac, Effet Josephson (1962) entre deux supraconducteurs, Microscopie à effet tunnel,...

### 2.2.6 Étude d'un puit de potentiel carré : États liés

On se limite dans ce paragraphe à l'étude, à une dimension, d'une particule de masse  $m$  soumise à l'énergie potentielle  $V(x)$ , et dont l'énergie  $E$  telle que :  $-V_0 < E < 0$ . Cette particule se trouve dans le puit de potentiel carré représenté sur la figure ci-dessous,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a \\ -V_0 & \text{si } |x| < a \end{cases} \quad (V_0 > 0),$$

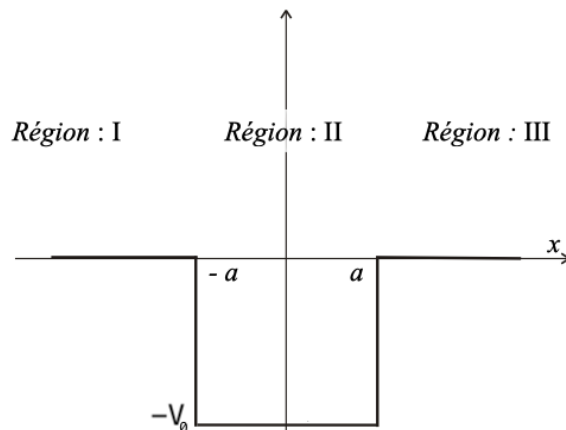


Figure 2.11: Barrière de potentiel.

L'étude d'une particule d'énergie négative dans un puit de potentiel carré donne une bonne approximation simple de tous les systèmes liés (molécules, atomes, noyaux,...). Et donc, comme pour la barrière de potentiel, notre but consiste à l'étude du spectre de l'hamiltonien et des fonctions propres associés.



En posant :

$$q = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k = \sqrt{\frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}} \quad [2.56]$$

les solutions possibles (formes de la fonction d'onde) dans les divers régions sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{qx} + A'_1 e^{-qx} \\ \phi_2(x) &= A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} \\ \phi_3(x) &= A_3 e^{qx} + A'_3 e^{-qx} \end{aligned} \quad [2.57]$$

Compte tenu que la fonctions d'onde doit être bornées, cette condition impose  $A'_1 = 0$  et  $A_3 = 0$ . Ceci donne :

$$\begin{aligned} \phi_1(x) &= A_1 e^{qx} \\ \phi_2(x) &= A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} \\ \phi_3(x) &= A'_3 e^{-qx} \end{aligned} \quad [2.58]$$

En outre, les fonction d'onde ainsi que sa dérivée première doivent être continues en  $x = \pm a$ . Ces conditions fournissent 4 équations comme suit :

i) Raccordement en  $x = -a$  : continuité de  $\phi(x)$  et  $\phi'(x)$

$$\begin{cases} \phi_1(-a) = \phi_2(-a) \\ \phi'_1(-a) = \phi'_2(-a) \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} A_1 e^{-qa} = A_2 e^{-ika} + A'_2 e^{+ika} \\ qA_1 e^{-qa} = ik(A_2 e^{-ika} - A'_2 e^{+ika}) \end{cases} \quad [2.59]$$

$$\longrightarrow \begin{cases} A_2 = +\frac{q+ik}{2ik} e^{-(q+ik)a} A_1 \\ A'_2 = -\frac{q-ik}{2ik} e^{-(q+ik)a} A_1 \end{cases} \quad [2.60]$$

ii) Raccordement en  $x = +a$  : continuité de  $\phi(x)$  et  $\phi'(x)$

$$\begin{cases} \phi_2(+a) = \phi_3(+a) \\ \phi'_2(+a) = \phi'_3(+a) \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} A_2 e^{+ika} + A'_2 e^{-ika} = A'_3 e^{-qa} \\ ik(A_2 e^{+ika} - A'_2 e^{-ika}) = -qA'_3 e^{-qa} \end{cases} \quad [2.61]$$

$$\longrightarrow \begin{cases} A_2 = -\frac{q-ik}{2ik} e^{-(q+ik)a} A'_3 \\ A'_2 = +\frac{q+ik}{2ik} e^{-(q+ik)a} A'_3 \end{cases} \quad [2.62]$$

En combinant les relations [2.60] et [2.62], on en déduit que :

$$\begin{cases} \frac{A'_3}{A_1} = -\frac{q+ik}{q-ik} e^{ika} \\ \frac{A_3}{A_1} = -\frac{q-ik}{q+ik} e^{-ika} \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \left( \frac{q-ik}{q+ik} \right)^2 = e^{2ika} \quad [2.63]$$

et donc

$$\frac{q-ik}{q+ik} = \pm e^{ika} \quad [2.64]$$

i) 1<sup>ier</sup> cas :

$$\frac{q - ik}{q + ik} = -e^{ika} \rightarrow \frac{q}{k} = \tan(ka) \quad [2.65]$$

$$\rightarrow \cos^2(ka) = \frac{1}{1 + \tan^2(ka)} = \frac{k^2}{k^2 + q^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0} \quad [2.66]$$

$$\rightarrow |\cos(ka)| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} k \quad [2.67]$$

Nous obtenons les valeurs de  $k$  par une résolution graphique. Les valeurs de  $k$  qui conviennent correspondent aux abscisses des points d'intersections entre la droite (en orange)  $k/k_0$  [ $k_0 = \sqrt{8\pi m V_0}/\hbar$ ] et la courbe (en blue) représentant  $|\cos(ka)|$ .

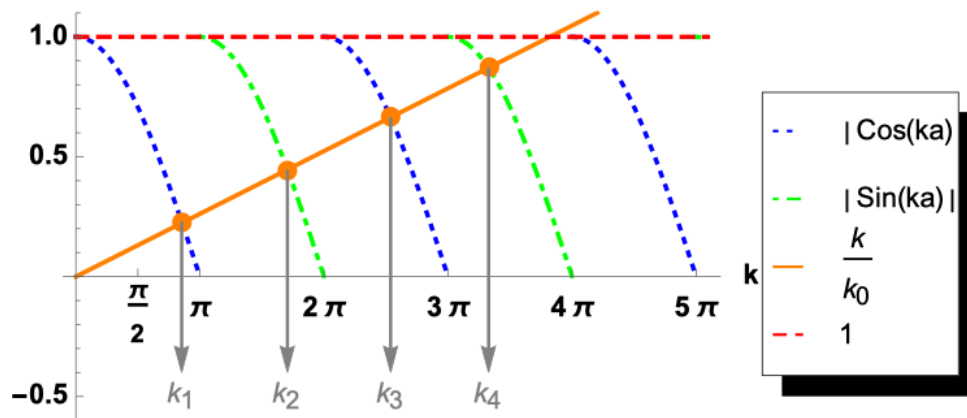


Figure 2.12: Résolution graphique des équations [2.67] et [2.67]. On prend arbitrairement  $a = 1$  et  $k_0 = 12$

ii) 2<sup>ieme</sup> cas :

$$\frac{q - ik}{q + ik} = +e^{ika} \rightarrow -\frac{q}{k} = \cot(ka) \quad [2.68]$$

$$\rightarrow \sin^2(ka) = \frac{\tan^2(ka)}{1 + \tan^2(ka)} = \frac{k^2}{k^2 + q^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0} \quad [2.69]$$

$$\rightarrow |\sin(ka)| = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}} k = \frac{k}{k_0} \quad [2.70]$$

les valeurs de  $k$  qui conviennent correspondent aux abscisses des points d'intersections entre la droite (en orange)  $k/k_0$  et la courbe (en vert) représentant  $|\sin(ka)|$ .

### Conclusion :

Les solutions possibles de  $k$  étant discrètes, il en sera de même pour les valeurs possibles de l'énergie  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - V_0$ . Il y a donc quantification de l'énergie.

### 2.2.7 Puits de potentiel carré infini

Le potentiel d'un puit de potentiel carré infini est représenté sur la figure [2.13].

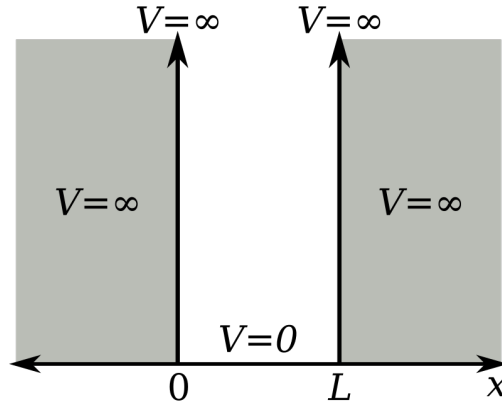


Figure 2.13: Puit de potentiel infini

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\phi''(x) + k^2\phi(x) = 0 \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad [2.71]$$

dont la solution est :

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx} \quad [2.72]$$

Les conditions de raccordement, continuité de  $\phi$  et non de sa dérivée, s'écrivent :

$$\begin{cases} \phi(0) = 0 \\ \phi(L) = 0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} A + A' = 0 \\ Ae^{ikL} + A'e^{-ikL} = 0 \end{cases} \quad [2.73]$$

$$\longrightarrow A' = -A \quad \text{et donc} \quad A(e^{ikL} - e^{-ikL}) = 0 \quad [2.74]$$

$$\longrightarrow \sin(kL) = 0 \longrightarrow k = n\frac{\pi}{L} \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{N}^* \quad [2.75]$$

L'énergie d'une particule dans ce cas est quantifiée, elle s'écrit :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad \text{avec} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad [2.76]$$

La fonction d'onde, solution de l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\phi(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) = 2iA \sin(kx) = 2iA \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) = b \sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right) \quad [2.77]$$

là, on peut remarquer que pour la valeur  $n = 0$ , la fonction d'onde  $\psi$  est nulle partout, et par conséquent cette valeur est exclue dans [2.76].

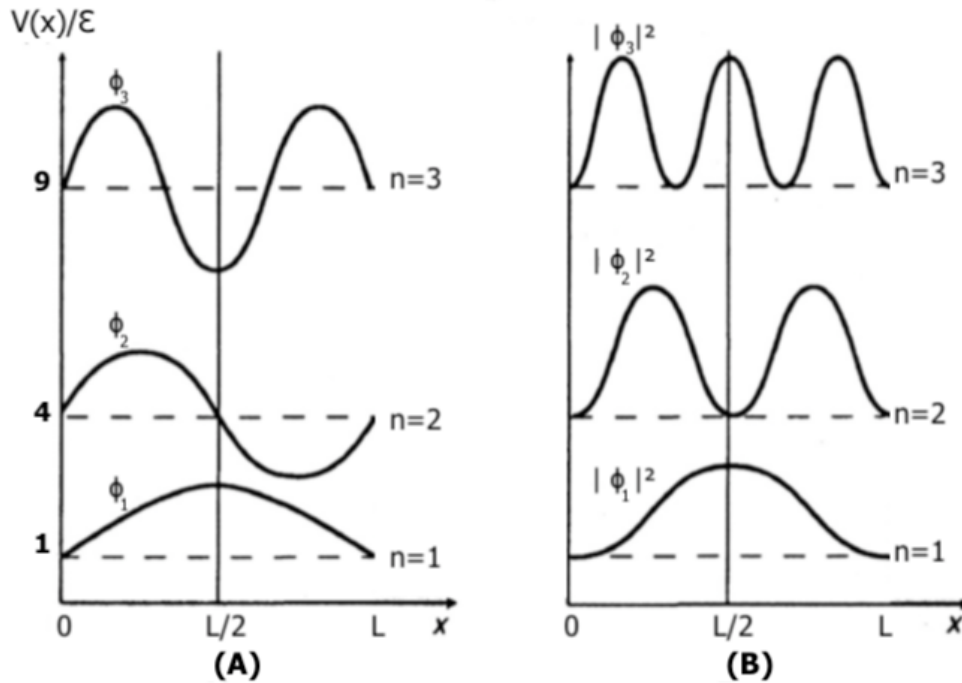


Figure 2.14: **(A)** : les trois premiers niveaux et les fonctions d'ondes associées pour une particule dans un puits infiniment profond. L'unité d'énergie est  $\epsilon = \hbar^2/8mL^2$ . **(B)** : les densités de probabilité associées.

Aussi, il est facile de normaliser ces fonctions d'ondes par la condition :

$$\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1, \quad [2.78]$$

qui donne [il faut remarquer que  $\sin^2(\theta) = (1 - \cos(2\theta))/2$ ]

$$b = \sqrt{\frac{2}{L}}. \quad [2.79]$$

Ainsi

$$\phi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(n \frac{\pi}{L} x\right). \quad [2.80]$$

La figure [2.14] montre les trois premiers niveaux ainsi que les fonctions stationnaires associées et la densité de probabilité  $|\phi_n|^2$  de la particule sur chacun de ces niveaux.

Remarques :

- i) Les extremums des fonctions d'onde correspondent à des densités maximales de présence de la particule. Les noeuds, au nombre de  $L-1$ , correspondent à des densités de probabilités nulles.

- i) Les fonctions d'onde sont paires ou impaires compte tenu de la parité du nombre entier  $n$ .

### 2.2.8 Cas particulier : Particule dans une boîte rectangulaire

Le confinement d'une particule libre dans une boîte rectangulaire, figure [2.15], peut être examiné comme corollaire du calcul précédent [problème à trois dimensions].

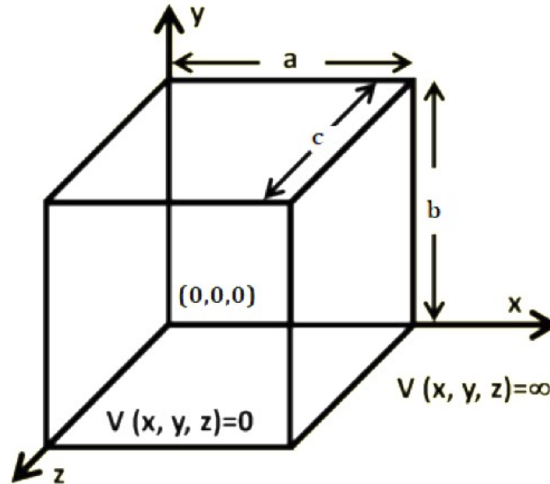


Figure 2.15: Boîte rectangulaire

Nous supposons la boîte munie de parois infranchissables, où le potentiel devient brusquement infini, étant nul à l'intérieur. Ce potentiel peut être écrit mathématiquement comme;

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{intérieur} \\ \infty & \text{sur les surfaces et à l'extérieur} \end{cases}$$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \phi = E \phi(x, y, z) \quad [2.81]$$

la solution est de la forme :

$$\phi(x, y, z) = \phi_{n_1}(x) \phi_{n_2}(y) \phi_{n_3}(z) \quad [2.82]$$

où  $\phi_{n_1}(x)$ ,  $\phi_{n_2}(y)$  et  $\phi_{n_3}(z)$  sont respectivement solutions des problèmes à une dimension en  $x$ ,  $y$  et  $z$ . Ceci permet d'écrire  $\phi$  sous la forme :

$$\phi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = A \sin\left(n_1 \frac{\pi}{a} x\right) \sin\left(n_2 \frac{\pi}{b} y\right) \sin\left(n_3 \frac{\pi}{c} z\right) \quad [2.83]$$

Il apparaît dans ce cas que le niveau  $E$  peut être atteint pour différentes combinaisons des nombres  $n_1$ ,  $n_2$  et  $n_3$ . Ceci correspond à plusieurs fonctions propres différentes  $\phi_{n_1 n_2 n_3}$ .

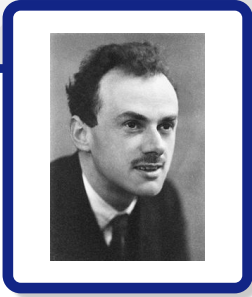
On dit dans ce cas que le niveau est dégénéré.

Cas particulier : boîte cubique ( $a = b = c$ )

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \quad [2.84]$$



# 3. Formalisme de la Mécanique Quantique



Toute loi physique doit être empreinte de beauté mathématique.

— Paul Dirac

## 3.1 Introduction

Avant de passer à l'expression analytique du modèle correspondant à la mécanique quantique, il est intéressant d'en rappeler les idées de base et les difficultés mathématiques que l'on rencontre dans les expressions analytiques qui en découlent.

L'impératif fondamental du modèle à construire doit être de rendre compte quantitativement des faits expérimentaux connus, entraînant deux conséquences :

- i)* à l'échelle élémentaire, on interprète les expériences en considérant que toute mesure introduit une perturbation imprévisible. En effet, si cette perturbation était prévisible, sans être cependant négligeable, on pourrait toujours construire une théorie qui en tiendrait compte. Nous traduisons ceci en disant qu'un système physique change généralement d'état au cours de la mesure : il passe d'un état initial que nous définirons ultérieurement à un état final qui ne peut pas être lié de façon *déterministe* à cet état initial. Pour construire le modèle, il ne reste plus pour définir l'état final qu'à le lier à la mesure elle-même, et encore faut-il pour sauvegarder l'imprévisibilité, qu'il y est au moins deux états finaux possibles. Le fait de lier l'état final à la mesure elle-même ouvre la possibilité d'un état final qui peut être, selon le type d'expérience, soit de type corpusculaire classique soit de type vibratoire classique.
- ii)* à l'échelle macroscopique, les modèles classiques ont reçu toutes les vérifications expérimentales souhaitables et il est donc indispensable qu'il puisse être déduit du modèle recherché, lorsque les conditions de validité des modèles classiques sont réunies. Cela peut s'exprimer en disant que le modèle quantique doit redonner un modèle classique lorsque la constante de Planck tend vers zéro. Cette condition importante est connue sous le nom de *principe de correspondance*. Il en résulte que



les faits fondamentaux de la mécanique classique doivent avoir leurs homologues en mécanique quantique.

Ces quelques principes (*déterministe, principe de correspondance*) vont servir de bases à la construction de notre modèle. Pour des raisons de commodités, nous procéderons par étapes, nous envisagerons d'abord le cas d'un espace des états rapporté à un ensemble de dimension infini non dénombrables. On se place dans le cas où les mesures se font sur un système physique pendant un temps suffisamment court pour que l'évolution naturelle du système puisse être négligée.

## 3.2 Espace des fonctions d'ondes J

### 3.2.1 Produit scalaire associé à J

Considérons un espace vectoriel "complexe"  $\mathbf{J}$ , on a :

$$\forall (\Psi_1, \Psi_2) \in \mathcal{J}, \forall (\lambda_1, \lambda_2) \in \mathcal{C}^2 : \lambda_1 \Psi_1 + \lambda_2 \Psi_2 \in \mathcal{J} \quad [3.1]$$

le produit scalaire associé à  $\mathbf{J}$  peut être défini en considérant l'application de  $\mathcal{J} \times \mathcal{J}$  vers le corps des nombres complexes  $\mathcal{C}$  définie par :

$$(\phi, \psi) \longrightarrow \int \phi^* \psi d\vec{r} \quad [3.2]$$

où  $\phi^*$  est le conjugué de  $\phi$ .

Le nombre complexe noté  $(\phi, \psi)$  définit le produit scalaire de  $\phi$  par  $\psi$ .

a) Propriétés :

$$\forall (\Psi, \phi, \phi_1, \phi_2, \psi, \psi_1, \psi_2) \in \mathcal{J}, \forall (\lambda_1, \lambda_2) \in \mathcal{C}^2$$

- $(\phi_1, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 (\phi_1, \psi_1) + \lambda_2 (\phi_1, \psi_2)$  : linéarité à droite.
- $(\lambda_1 \phi_1 + \lambda_2 \phi_2, \psi_1) = \lambda_1^* (\phi_1, \psi_1) + \lambda_2^* (\phi_2, \psi_1)$  : anti-linéarité à gauche.
- $(\phi, \psi) = \overline{(\psi, \phi)}$
- $(\phi, \phi) \geq 0$
- $(\phi, \phi) = 0 \iff \phi = 0$  non dégénérée.
- $\|\Psi\| = \sqrt{(\Psi, \Psi)}$  est par définition la norme de  $\Psi$ .

b) Relations Supplémentaires :

$$|(\phi, \psi)|^2 \leq (\phi, \phi)(\psi, \psi) \quad \text{relation de Cauchy – Schwarz} \quad [3.3]$$

$$(\phi + \psi, \phi + \psi) \leq (\phi, \phi) + (\psi, \psi) \quad \text{relation de Minkowski} \quad [3.4]$$

L'espace des fonctions d'ondes  $\mathbf{J}$ , espace vectoriel complexe muni d'un produit scalaire hermitien, est dit espace de Hilbert ou espace Hermitien.

### 3.2.2 Décomposition d'une fonction d'onde sur la base des ondes planes

#### a) Transformée de Fourier à une dimension :

Définition : Soit la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  d'une particule se déplaçant le long de l'axe  $x$  avec une quantité de mouvement  $p$  [ $p = p_x$ ]. La transformée de Fourier de  $\psi(x, t)$  est une fonction  $\phi(p, t)$  définie par :

$$\phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx. \quad [3.5]$$

Inversement,  $\psi(x, t)$  peut être déterminée par la transformée de Fourier inverse de  $\phi(p, t)$ ,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, t) e^{+\frac{ipx}{\hbar}} dp. \quad [3.6]$$

#### b) Transformée de Fourier dans l'espace à trois dimensions :

Définition : la transformée de Fourier d'une fonction d'onde dans l'espace à trois dimensions s'écrit :

$$\phi(\vec{p}, t) = TF[\psi(\vec{r}, t)] = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} d^3\vec{r}. \quad [3.7]$$

et

$$\psi(\vec{r}, t) = TF^{-1}[\phi(\vec{p}, t)] = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(\vec{p}, t) e^{+\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} d^3\vec{p}. \quad [3.8]$$

#### c) Égalité de Parseval et Plancherel. Conservation de la norme :

À partir des équations [3.7] et [3.8], on peut aisément démontrer la relation suivante :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(p, t)|^2 dp \quad [3.9]$$

qui s'appelle *Égalité de Parseval & Plancherel* et qui traduit la propriété de conservation de la norme.

#### Preuve

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(p, t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dp \right) \psi(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) dx e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \right) \phi^*(p, t) dp \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, t) \phi^*(p, t) dp \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(p, t)|^2 dp \end{aligned} \quad [3.10]$$

d) Fonction de Dirac  $\delta(x)$  :

Comme par la suite, nous ferons appelle à la fonction (distribution) de Dirac  $\delta(x)$ , nous donnerons un bref aperçu sur ses propriétés. Considerons la fonction  $\delta^\epsilon(x - x_0)$  définie par :

$$\forall x \in \mathcal{R}, \delta^\epsilon(x - x_0) = \begin{cases} \frac{1}{\epsilon} & \text{si } |x - x_0| \leq \frac{\epsilon}{2} \\ 0 & \text{si } |x - x_0| > \frac{\epsilon}{2}, \end{cases}$$

et dont le comportement est représenté par la figure [3.1] suivante :

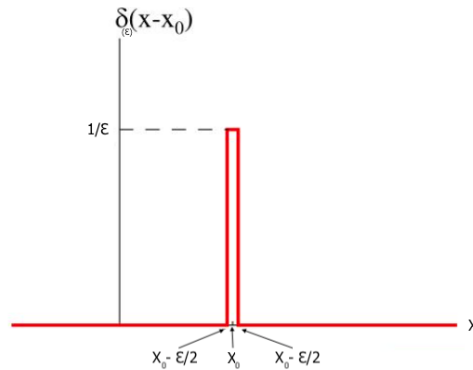


Figure 3.1: Fonction  $\delta$  de Dirac centrée en  $x_0$

Définition :

On appelle fonction de Dirac la fonction  $\delta(x - x_0)$  définie par :

$$\forall x \in \mathcal{R}, \delta(x - x_0) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \delta^\epsilon(x - x_0) \quad [3.11]$$

Propriétés :

★ Pour toute fonction  $f$ , on a :

$$\forall x \in \mathcal{R}, \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$$

$$\star \delta(-x) = \delta(x)$$

$$\star \delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x)$$

$$\star x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$$

$$\star \delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a} (\delta(x + a) + \delta(x - a))$$

$$\star TF[\delta(x - x_0)] = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{px_0}{\hbar}}$$

## e) Base des ondes planes :

Définition : Soient les fonctions définies par :

$$\nu_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{i\frac{px}{\hbar}}, \quad \forall x \in \mathcal{R} \quad [3.12]$$

Ces fonctions représentent des *ondes planes*.

Les relations [3.5] et [3.6] s'écrivent alors sous la forme :

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(p, t) \nu_p(x) dp \quad \text{et} \quad \phi(p, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t) \bar{\nu}_p(x) dx \quad [3.13]$$

avec

$$\bar{\nu}_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i\frac{px}{\hbar}}, \quad [3.14]$$

représente le conjugué de  $\nu_p(x)$ .

Ces relations montrent que

- i) l'ensemble des ondes planes forment une base de l'espace des fonctions d'onde: *toute fonction d'onde se décompose d'une manière unique sur  $\{\nu_p(x)\}$*
- ii) la base  $\{\nu_p(x)\}$  est une base orthogonale dans l'espace; c'est-à-dire qu'elle vérifie la relation de fermeture :

$$(\nu_p, \nu_q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\nu}_p(x) \nu_q(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\frac{x(q-p)}{\hbar}} \frac{dx}{\hbar} = \delta(p - q), \quad [3.15]$$

où  $\delta$  est la fonction (distribution) de Dirac.

Pour généraliser au cas tridimensionnel, il suffit de prendre les vecteurs :

$$\circ \forall \vec{r} = (x, y, z)$$

$$\nu_p(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}} \quad [3.16]$$

## 3.2.3 Opérateur associé à la mesure d'une grandeur physique

## a) Définitions :

Un opérateur (ou opérateur fonctionnelle) est un être mathématique agissant dans l'espace des fonctions **J**. Autrement dit, **A** est une application définie par :

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &\longrightarrow \mathcal{J} \\ \psi &\longrightarrow \mathbf{A}\psi \end{aligned} \quad [3.17]$$

L'opérateur **A** est dit linéaire si et seulement si :

$$\begin{aligned} \forall (\psi_1, \psi_2) \in \mathcal{J}^2, \quad \forall (\lambda_1, \lambda_2) \in \mathcal{C}^2 \\ \mathbf{A}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1\mathbf{A}\psi_1 + \lambda_2\mathbf{A}\psi_2 \end{aligned} \quad [3.18]$$

Considérons deux opérateurs linéaires **A** et **B** :

- $\mathbf{A+B}$  est un opérateur linéaire dit somme des opérateurs  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ ;
- $\mathbf{AB}$  est un opérateur linéaire dit produit des opérateurs  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ ;
- $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$  est un opérateur linéaire appelé **commutateur** des opérateurs  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ .

### b) Postulats :

À ce stade, nous ne ferons qu'énoncer les propriétés de quelques postulats que nous le verrons de détail, au chapitre ?? :

*Toute grandeur physique mesurable  $A$  est décrit par un opérateur linéaire hermétique (toutes ses valeurs propres sont réelles)  $\mathbf{A}$  agissant dans l'espace des fonctions d'onde.*

*Si une particule est décrite par une fonction d'onde  $\psi$ , fonction propre de  $\mathbf{A}$  pour la valeur propre  $a$ , ( $\mathbf{A}\psi = a\psi$ ), alors le résultat de la mesure de la grandeur physique  $A$  est la valeur propre  $a$ .*

Par la suite, nous nous intéressons à deux opérateurs fondamentaux en mécanique quantique, à savoir l'opérateur *Position* et l'opérateur *Quantité de mouvement* (impulsion), et quelques une de leurs propriétés.

### c) Opérateur associé à la position :

La fonction d'onde décrivant une particule parfaitement localisé en  $x_0$  est :  $\psi(x) = \delta(x - x_0)$ , avec  $x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$ .

L'opérateur associé  $\mathbf{X}$ , associé à la position est simplement la multiplication par  $x$  de la fonction d'onde:

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &\longrightarrow \mathcal{J} \\ \psi &\longrightarrow x\psi \end{aligned} \quad [3.19]$$

### d) Opérateur associé à la position :

D'après Louis de Broglie, une particule de quantité de mouvement  $p_x$  se déplaçant le long de l'axe des  $x$  est décrite par une fonction d'onde plane  $\psi(x, t) = \text{cte} e^{i(k_x x - \omega t)}$ . La longueur d'onde  $\lambda$  qui lui est associée est donnée par :

$$\lambda = \frac{2\pi}{k_x} = \frac{h}{p_x} \implies p_x = \frac{h}{2\pi} k_x = \hbar k_x \quad [3.20]$$

La fonction d'onde ainsi définie est nécessairement fonction propre de l'opérateur quantité de mouvement  $\mathbf{P}_x$  pour la valeur  $p_x$  :

$$\mathbf{P}_x \psi(x, t) = p_x \psi(x, t)$$

Où

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = \frac{ip_x}{\hbar}\psi(x,t) \implies -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = p_x\psi(x,t) \quad [3.21]$$

On en déduit l'équivalence suivante :

$$\mathbf{P}_x \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad [3.22]$$

Généralisation :

Le même raisonnement nous permet d'identifier les équivalences,

$$\mathbf{P}_y \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad \text{et} \quad \mathbf{P}_z \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \quad [3.23]$$

Par conséquent, l'opérateur quantité de mouvement  $\mathbf{P}$  dans l'espace à trois dimensions s'écrit simplement :

$$\mathbf{P} \equiv -i\hbar\nabla \quad [3.24]$$

où  $\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$  est l'opérateur gradient.

### e) Propriétés importantes des opérateurs position et quantité de mouvement :

Les trois composantes des opérateurs position et quantité de mouvement obéissent aux relations de commutation canoniques suivantes :

$$[\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j] = [\mathbf{P}_i, \mathbf{P}_j] = 0 \quad [3.25]$$

$$[\mathbf{X}_i, \mathbf{P}_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \forall i, j \in \{1, 2, 3\} \quad [3.26]$$

Démonstration :

Les coordonnées  $x$ ,  $y$  et  $z$  étant indépendantes entre elles implique que les opérateurs associés commutent. Le même raisonnement s'applique aux coordonnées de l'opérateurs quantité de mouvement.

$$\forall \psi \in \mathcal{J} \\ x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) - \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\psi\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial x}\psi - \psi - x\frac{\partial}{\partial x}\psi\right) = i\hbar\psi \quad [3.27]$$

### f) Principe d'incertitude de Heisenberg :

Déterminisme newtonien :

Selon la loi fondamentale de la mécanique newtonienne, si les coordonnées de la position et de la vitesse initiales sont données par  $\vec{r}(t=0)$  et  $\vec{v}(t=0)$  respectivement, et si l'on connaît toutes les forces agissant sur la particule, alors la trajectoire  $\vec{r}(t)$  sera déterminée de façon unique. C'est cela le sens du déterminisme de la mécanique newtonienne.

Indéterminisme quantique :

La mécanique quantique va apporter des limitations quant à la possibilité de donner une

description déterministe des lois de la Nature.

En 1927, Heisenberg a énoncé le principe d'incertitude (ou plus précisément d'indétermination), pour la position  $x$  et l'impulsion  $p$ , comme suit :

*Si l'impulsion d'une particule est déterminée avec précision, alors la position de cette particule est complètement indéterminée et inversement :*

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad [3.28]$$

où

- $\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$  est l'écart quadratique moyen de  $x$ ;
- $\Delta p_x = \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle - \langle p_x \rangle^2}$  est l'écart quadratique moyen de  $p_x$ .
- $\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx$  et  $\langle p_x \rangle = \int \psi^* p_x \psi dx$  représentent les valeurs moyennes de  $x$  et de  $p_x$  respectivement.

N.B : une démonstration de la relation [3.28] est donnée en détail dans l'??.

La relation de Heisenberg [3.28] s'écrit aussi pour le couple de variables énergie-temps comme suit :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \quad [3.29]$$

Cette indétermination est fondamentale puisqu'elle est due à la double nature des objets quantiques (onde-corpuscule) et à l'existence du quantum de lumière (le photon  $\gamma$ ).

### 3.3 Espace des états, Notation de Dirac

L'état quantique d'un système physique est caractérisé par un *vecteur* d'état, appartenant à un espace des états du système, noté  $E$ .

#### 3.3.1 Structure de l'espace $E$ : espace des *ket*

**a)**  $E$  est un espace vectoriel complexe muni d'un produit scalaire hermitien. Il est dit espace de *Hilbert* ou *Hilbertien*.

**b)** Les éléments de l'espace  $E$  sont des vecteurs appelées vecteurs *kets*. On les note sous la forme  $|\psi\rangle$ .

Dans le paragraphe précédent, nous avons introduit la notion de fonction d'onde  $\Psi \in \mathcal{J}$ , pour l'état quantique du système. La correspondance entre la description en terme de fonction d'onde  $\Psi \in \mathcal{J}$  et celle par vecteur d'état, appelé ket et noté  $|\psi\rangle$  de  $E$ , est réalisée par :

$$\Psi \in \mathcal{J} \iff |\psi\rangle \in E \quad [3.30]$$

c) Produit scalaire associé à E :

Considérons l'application définie par :

$$\begin{aligned} E \times E &\longrightarrow \mathbb{C} \\ (|\phi\rangle, |\psi\rangle) &\longrightarrow \langle\phi|\psi\rangle = \int \bar{\phi}\psi d^3\vec{r} \end{aligned} \quad [3.31]$$

Cette application est une forme hermitienne positive non dégénérée sur E, en effet :

$$\forall (\phi, \phi_1, \phi_2, \psi, \psi_1, \psi_2) \in E, \forall (\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{C}^2$$

- $\langle\phi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\phi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\phi|\psi_2\rangle$  : linéarité à droite.
- $\langle\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2|\psi\rangle = \lambda_1\langle\phi_1|\psi\rangle + \lambda_2\langle\phi_2|\psi\rangle$  : anti-linéarité à gauche.
- $\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$  : hermiticité
- $\langle\phi|\phi\rangle \geq 0$  : positivité
- $\langle\phi|\phi\rangle = 0 \iff \phi = 0$  non dégénérée.
- $\|\Psi\| = \sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$  est par définition la norme de  $\Psi$ .

Elle définit le produit scalaire dans l'espace E. que l'on note par :  $\langle\phi|\psi\rangle$ .

### 3.3.2 Structure de l'espace dual $E^*$ : espace des *bra*

a) Définition :

Soit un ket  $|\phi\rangle$  de E. Considérons la fonctionnelle linéaire de E vers le corps des nombres complexes  $\mathbb{C}$

$$\begin{aligned} E &\longrightarrow \mathbb{C} \\ |\psi\rangle &\longrightarrow \langle\phi|\psi\rangle \end{aligned} \quad [3.32]$$

l'objet défini par  $\langle\phi|$  est appelé le vecteur *bra*.

L'ensemble des bras  $\langle\phi|$  forme l'espace vectoriel  $E^*$ , appelé l'espace *dual* de E.

Théorème :

$$\forall |\phi\rangle \in E \iff \langle\phi| \in E^* \quad [3.33]$$

a) Propriétés :

- \*  $E^*$  est espace vectoriel sur le corps des nombres complexes  $\mathbb{C}$ ,
- \*  $\dim E^* = \dim E$ ,
- \* la correspondance  $\text{bra} \longleftrightarrow \text{ket}$  est anti-linéaire

$$\begin{aligned} \forall (\phi_1, \phi_2) \in E^2, \forall (\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{C}^2 \\ |\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = |\lambda_1\psi_1\rangle + |\lambda_2\psi_2\rangle \longrightarrow \lambda_1^*\langle\psi_1| + \lambda_2^*\langle\psi_2| \end{aligned} \quad [3.34]$$



### 3.3.3 Opérateurs linéaires

#### a) Définition :

Un opérateur  $\mathbf{A}$  est un être mathématique agissant dans l'espace des états  $E$ . Son action se traduit par une application définie par :

$$\begin{aligned} E &\longrightarrow E \\ |\psi\rangle &\longrightarrow \mathbf{A}|\psi\rangle \end{aligned} \quad (3.35)$$

L'opérateur  $\mathbf{A}$  est dit linéaire si et seulement si :

$$\begin{aligned} \forall(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \in E^2, \quad \forall(\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{C}^2 \\ \mathbf{A}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1\mathbf{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2\mathbf{A}|\psi_2\rangle \end{aligned} \quad (3.36)$$

#### b) Propriétés :

Soient  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{C}$  trois opérateurs linéaires. Nous définissons les opérations suivantes :

$$\begin{aligned} \mathbf{A} + \mathbf{B} &= \mathbf{B} + \mathbf{A} && \text{[commutativité de l'addition]} \\ \mathbf{A} + (\mathbf{B} + \mathbf{C}) &= (\mathbf{A} + \mathbf{B}) + \mathbf{C} && \text{[associativité de l'addition]} \\ \mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{C}) &= (\mathbf{A}\mathbf{B})\mathbf{C} && \text{[associativité du produit]} \\ (\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} &= \mathbf{A}\mathbf{C} + \mathbf{B}\mathbf{C} && \text{[distributivité à gauche]} \\ \mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) &= \mathbf{A}\mathbf{B} + \mathbf{A}\mathbf{C} && \text{[distributivité à droite]} \end{aligned} \quad (3.37)$$

#### c) Généralités sur les commutateurs :

Définition: On appelle commutateur de  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  pris dans cet ordre, l'opérateur noté  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$  et défini par :

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A}$$

$\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  commutent si et seulement si  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$ . En plus,

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}] \quad (3.38)$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B} + \mathbf{C}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}] \quad (3.39)$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}\mathbf{C}] = [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} + \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}] \quad (3.40)$$

$$[\mathbf{A}\mathbf{B}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B} \quad (3.41)$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}^n] = \sum_{p=0}^{n-1} \mathbf{B}^p [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \mathbf{B}^{n-p-1}; \text{ avec } n \in \mathbb{N}^* \quad (3.42)$$

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]] + [\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0 \text{ (identité de Jacobi)} \quad (3.43)$$

#### d) Fonctions d'opérateurs :

Soit  $f(x)$  une fonction indéfiniment dérivable. La série de Taylor associée à  $f$  s'écrit :

$$f(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n x^n \quad \text{où } f_n = \frac{1}{n!} \left( \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \right) \Big|_{x=0} \quad (3.44)$$

Soit  $\mathbf{A}$  un opérateur linéaire quelconque. L'opérateur  $f(A)$  est défini tel que :

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n \mathbf{A}^n \quad [3.45]$$

Exemple :

$$e^x = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots \implies e^{\mathbf{A}} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\mathbf{A}^n}{n!} = 1 + \mathbf{A} + \frac{\mathbf{A}^2}{2!} + \frac{\mathbf{A}^3}{3!} + \dots \quad [3.46]$$

Remarques :

$$e^{\mathbf{A}} e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}} e^{\frac{1}{2}[\mathbf{A},\mathbf{B}]} \quad \text{(formule de Glauber)} \quad [3.47]$$

$$e^{\mathbf{A}} e^{\mathbf{B}} \neq e^{\mathbf{B}} e^{\mathbf{A}} \quad \text{et} \quad e^{\mathbf{A}} e^{\mathbf{B}} \neq e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}}. \quad [3.48]$$

les deux inégalités de [3.48] ne sont valables que si  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$ .

### e) Opérateur linéaire adjoint :

Définition: Soit  $\mathbf{A}$  un opérateur linéaire associant à tout ket  $|\psi\rangle$  de  $E$  un ket

$$|\psi'\rangle = \mathbf{A}|\psi\rangle.$$

L'opérateur adjoint  $\mathbf{A}^\dagger$ , appelé aussi conjugué hermitique, de  $\mathbf{A}$  est défini par :

$$\langle \psi' | = \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger.$$

Autrement dit, nous avons l'équivalence suivante :

$$\forall |\psi\rangle \in E, |\psi'\rangle = \mathbf{A}|\psi\rangle \iff \langle \psi' | = \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger \quad [3.49]$$

Propriétés:

i)

$$(\mathbf{A}^\dagger)^\dagger = \mathbf{A} \quad [3.50]$$

$$(\lambda \mathbf{A})^\dagger = \lambda^* \mathbf{A}^\dagger \quad [3.51]$$

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B})^\dagger = \mathbf{A}^\dagger + \mathbf{B}^\dagger \quad [3.52]$$

$$(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger \quad [3.53]$$

$$\text{ii) } \forall (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \in E^2, \quad \langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger | \phi \rangle$$

\*  $\langle \phi | \mathbf{A} | \psi \rangle = \langle \phi | \psi' \rangle = \langle \psi' | \phi \rangle^*$  : le produit scalaire est hermitien.

\*  $|\phi\rangle = \mathbf{AB}|\psi\rangle = \mathbf{A}(\mathbf{B}|\psi\rangle) = \mathbf{A}|\chi\rangle \iff \langle \phi | = \langle \chi | \mathbf{A}^\dagger = (\langle \psi | \mathbf{B}^\dagger) \mathbf{A}^\dagger = \langle \psi | \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger$

\*  $|\phi\rangle = \lambda \mathbf{A}|\psi\rangle = \lambda |\psi'\rangle \iff \langle \phi | = \lambda^* \langle \psi' | = \lambda^* \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger = \langle \psi | \lambda^* \mathbf{A}^\dagger$

**f) Conjugaison hermétique d'une expression donnée :**

Pour obtenir le conjugué hermétique (ou adjoint) d'une expression donnée, il suffit de :

1. -Remplacer :

- les constantes par leurs complexes conjuguées;
- les kets par les bras associés;
- les bras par les kets associés;
- les opérateurs par leurs adjoints;

2. -Renverser l'ordre des termes (la place des constantes n'a aucune importance)

Exemples :

$$\star \left\{ \lambda \mathbf{A} |\psi\rangle + \mu \langle \phi | \mathbf{B} \mathbf{C} | \psi \rangle \right\}^\dagger = \left( \lambda \mathbf{A} | \psi \rangle \right)^\dagger + \left( \mu \langle \phi | \mathbf{B} \mathbf{C} | \psi \rangle \right)^\dagger = \lambda^* \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger + \mu^* \langle \psi | \mathbf{C}^\dagger \mathbf{B}^\dagger | \phi \rangle$$

$$\star \left( \mathbf{A}^n \right)^\dagger = \left( \mathbf{A}^\dagger \right)^n$$

$$\star \left( e^{\mathbf{A}} \right)^\dagger = \left( \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\mathbf{A}^n}{n!} \right)^\dagger = \sum_{n=0}^{+\infty} \left( \frac{\mathbf{A}^n}{n!} \right)^\dagger = \sum_{n=0}^{+\infty} \left( \frac{\left( \mathbf{A}^\dagger \right)^n}{n!} \right)$$

$$\star \left( e^{\lambda \mathbf{A}} \right)^\dagger = e^{\lambda^* \mathbf{A}^\dagger} \quad ; \quad \left( e^{i \mathbf{A}} \right)^\dagger = e^{-i \mathbf{A}^\dagger}$$

$$\star [\mathbf{A}, \mathbf{B}]^\dagger = \left( \mathbf{A} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{A} \right)^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger - \mathbf{A}^\dagger \mathbf{B}^\dagger = [\mathbf{B}^\dagger, \mathbf{A}^\dagger]$$

**g) Opérateurs hermétiques :**

Définition: un opérateur linéaire est dit hermétique (ou bien auto adjoint) si et seulement si :  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ .

Exemple : L'opérateur projecteur

L'opérateur  $P_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$  est par définition l'opérateur projecteur sur le ket  $|\psi\rangle$ :

$$\forall |\phi\rangle \in E, \quad P_{|\psi\rangle}(|\phi\rangle) = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle \text{ est un ket colinéaire à } |\psi\rangle \quad [3.54]$$

L'opérateur  $P_{|\psi\rangle} = |\psi\rangle\langle\psi|$  est hermétique car  $\left( P_{|\psi\rangle} \right)^\dagger = \left( |\psi\rangle\langle\psi| \right)^\dagger = P_{|\psi\rangle}$ .

Si de plus le ket  $|\psi\rangle$  est normé, alors  $\left( P_{|\psi\rangle} \right)^2 = P_{|\psi\rangle} P_{|\psi\rangle} = P_{|\psi\rangle}$ . On dit alors qu'il est *idempotent*

Remarque

En physique quantique (ainsi qu'en mathématiques et en informatique), l'idempotence signifie qu'une opération a le même effet qu'on l'applique une ou plusieurs fois.

**h) Opérateurs unitaires :**

Définition: un opérateur  $\mathbf{A}$  est dit unitaire si et seulement si :  $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^\dagger$ . Ainsi :

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A} = \mathbb{1} \quad [3.55]$$

Remarque

Si  $\mathbf{A}$  est hermétique, alors  $e^{i\mathbf{A}}$  est unitaire.

En effet,

$$e^{i\mathbf{A}}(e^{i\mathbf{A}})^\dagger = e^{i\mathbf{A}}(e^{-i\mathbf{A}}) = \mathbb{1} \quad [3.56]$$

**3.3.4 Représentations dans l'espace des états E :****a) Représentation dans une base discrète finie :**

Comme la base étant discrète, l'espace des états est de dimension finie. On note  $|u_k\rangle$  une base orthonormé de E. Dans ce contexte,

\* Tout ket  $|\psi\rangle$  de E est représenté dans cette base par une matrice colonne dont les éléments sont par définition les composantes du ket  $|\psi\rangle$  :

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |u_k\rangle \iff |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{n-1} \\ c_n \end{pmatrix} \quad [3.57]$$

\* Le bra,  $\langle\psi|$ , associé au ket  $|\psi\rangle$ , est représenté par une matrice ligne dont les éléments sont les complexes conjugués des  $c_k$ ,

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |u_k\rangle \iff \langle\psi| = \sum_k c_k^* \langle u_k| \iff \langle\psi| = (c_1^*, c_2^*, c_3^*, \dots, c_{n-1}^*, c_n^*) \quad [3.58]$$

\* Tout opérateur linéaire  $\mathbf{A}$  est représenté par une matrice carré noté  $A = (A_{ij})$  où le  $A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$  est appelé élément de matrice où  $i$  est l'indice des lignes, et  $j$  est l'indice des colonnes.

\* L'opérateur adjoint  $\mathbf{A}^\dagger$  de  $\mathbf{A}$  est représenté par la matrice adjointe de la matrice  $A$  :

$$A^\dagger = ({}^t A^*) = (A_{ji}^*) \quad [3.59]$$

En effet,  $A_{ij}^\dagger = \langle u_i | A^\dagger | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^* = A_{ij}^*$ .

Exemple

Supposons l'espace  $E$  est de dimension 3.  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$  une base de  $E$ .  
Soit l'opérateur  $\mathbf{A}$  défini par :

$$\mathbf{A}|u_1\rangle = a|u_1\rangle, \quad \mathbf{A}|u_2\rangle = a|u_3\rangle, \quad \mathbf{A}|u_3\rangle = a|u_2\rangle$$

L'opérateur  $\mathbf{A}$  est représenté dans la base  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle$  par la matrice carré :

$$A = a \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

### b) Relation de fermeture :

$\forall |\psi\rangle \in E, \quad |\psi\rangle = \sum_k c_k |u_k\rangle$  où  $c_k = \langle u_k | \psi \rangle$  est la projection de  $|\psi\rangle$  sur le ket  $|u_k\rangle$ ; d'où :

$$|\psi\rangle = \sum_k |u_k\rangle \langle u_k | \psi \rangle = \left( \sum_k |u_k\rangle \langle u_k| \right) |\psi\rangle \longrightarrow \sum_k |u_k\rangle \langle u_k| = \mathbb{1} \quad (3.61)$$

cette relation est appelée *relation de fermeture*.

### c) Cas d'une base continue : Les représentations $\{|r\rangle\}$ et $\{|p\rangle\}$

Représentation  $\{|r\rangle\}$  :

L'état dynamique d'une particule parfaitement localisée au point  $x_0$  est décrit par le ket  $|x_0\rangle$  associé à la fonction d'onde  $\xi_{x_0}(x - x_0) = \delta(x - x_0)$ . Par analogie avec l'espace des fonctions d'onde, on a les propriétés suivantes :

- Équation aux valeurs propres :

$$X\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0) \iff \mathbf{X}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle \quad (3.62)$$

- $\{|r\rangle\}$  est une base de  $E$

- Orthonormalisation:

$$\langle x_0 | x'_0 \rangle = \langle \xi_{x_0} | \xi_{x'_0} \rangle = \delta(x_0 - x'_0) \quad (3.63)$$

- Relation de fermeture :

$$\int |x\rangle \langle x| dx = \mathbb{1} \quad (3.64)$$

*Preuve:*  $\forall |x_0\rangle \in E,$

$$|x_0\rangle = \int |x\rangle \delta(x - x_0) dx = \int |x\rangle \langle x | x_0 \rangle dx = \left( \int |x\rangle \langle x| dx \right) |x_0\rangle \quad (3.65)$$

Représentation  $\{|p\rangle\}$  :

L'état dynamique d'une particule, ayant la quantité du mouvement  $p$ , est parfaitement déterminé et décrit par le ket  $|p\rangle$  associé à la fonction d'onde  $\nu_p(x) = e^{ipx/\hbar} / \sqrt{2\pi\hbar}$ .

Par analogie avec l'espace des fonctions d'onde, on a les propriétés suivantes :

- Équation aux valeurs propres :

$$P\nu_p(x) = p\nu_p(x), \left( \text{où } P = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \iff \mathbf{P}|p\rangle = p|p\rangle \quad [3.66]$$

- $\{|p\rangle\}$  est une base de E

- Orthonormalisation:

$$\langle p|p_0\rangle = \langle \nu_p(x)|\nu_{p_0}(x)\rangle = \delta(p - p_0) \quad [3.67]$$

- Relation de fermeture :

$$\int |p\rangle\langle p|dp = \mathbb{1} \quad [3.68]$$

*Preuve:*  $\forall |p_0\rangle \in E,$

$$|p_0\rangle = \int |p\rangle\delta(p - p_0)dp = \int |p\rangle\langle p|p_0\rangle dp = \left( \int |p\rangle\langle p|dp \right) |p_0\rangle \quad [3.69]$$

Composantes d'un ket  $|\psi\rangle$  dans la base  $\{|p\rangle\}$ :

$$|\psi\rangle = \int \phi(p)|p\rangle dp, \quad \phi(p) = \langle p|\psi\rangle = TF[\psi] \quad [3.70]$$

*Démonstration:*

$$|\psi\rangle = \left( \int |p\rangle\langle p|dp \right) |\psi\rangle = \int |p\rangle dp \langle p|\psi\rangle$$

$$\text{où } \langle p|\psi\rangle = \int \nu_p^*(x)\psi(x)dx = \phi(p) = TF[\psi]$$

Généralisation : Représentations  $\{|r\rangle\}$  et  $\{|p\rangle\}$ :

Soit  $|r\rangle = |x, y, z\rangle$  et  $|p\rangle = |p_x, p_y, p_z\rangle$ . On a

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

$$\mathbf{P}_x|p\rangle = p_x|p\rangle, \quad \mathbf{P}_y|p\rangle = p_y|p\rangle, \quad \mathbf{P}_z|p\rangle = p_z|p\rangle$$

$$\langle r|r_0\rangle = \delta(r - r_0), \quad \langle p|p_0\rangle = \delta(p - p_0) \quad \text{Relations d'orthonormalisation}$$

$$\int |r\rangle dr \langle r| = 1, \quad \int |p\rangle dp \langle p| = 1 \quad \text{Relations de fermeture} \quad [3.71]$$

### 3.3.5 Équations aux valeurs propres d'un opérateur :

#### a) Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur

On dit que le ket  $|\psi\rangle$  est un **vecteur propre** d'un opérateur linéaire  $\mathbf{A}$  si :

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \quad [3.72]$$

où  $\lambda$  est un nombre complexe appelé **valeur propre** de  $\mathbf{A}$ .

Soient  $c_i = \langle u_i|\psi\rangle$  les composantes de  $|\psi\rangle$  et  $A_{ij} = \langle u_i|\mathbf{A}|u_j\rangle$  les éléments de matrice de  $\mathbf{A}$  dans la base orthonormée  $\{|u_i\rangle\}$  de E.

Multiplions l'équation [3.72] par  $\langle u_i |$  et insérons la relation de fermeture entre  $\mathbf{A}$  et  $|\psi\rangle$ . On obtient :

$$\langle u_i | \mathbf{A} \mathbb{1} | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | \mathbf{A} | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \lambda \langle u_i | \psi \rangle$$

soit

$$\sum_j A_{ij} c_j = \lambda c_i = \lambda \sum_j c_j \delta_{ij}$$

ou bien

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

C'est un système linéaire homogène dont les inconnues sont les  $c_i$ . Il n'a de solutions que si :

$$\text{Det}[\hat{A} - \lambda \mathbb{1}] = 0$$

C'est l'équation caractéristique de  $\mathbf{A}$ , c'est une équation de degré  $n$  en  $\lambda$  dont les racines sont les valeurs propres  $\lambda_l$  de l'opérateur  $\mathbf{A}$ . Dans cette équation,  $\hat{A}$  est la matrice représentant l'opérateur  $\mathbf{A}$  dans la base  $\{|u_i\rangle\}$ .

On détermine les  $g_l$  vecteurs propres  $|\psi_{l,k}\rangle$  ( $k = 1, 2, \dots, g_l$ ) associé à la valeur propre  $\lambda_l$  en résolvant le système. On choisit ces vecteurs normés et orthogonaux deux à deux.

Remarque :

- Une valeur propre est dite **simple** (ou **non dégénérée**) s'il ne lui est associé qu'un **seul** vecteur propre. Si **plusieurs** vecteurs propres lui sont associés, la valeur propre est dite **dégénérée**.
- L'ensemble des valeurs propres  $\{\lambda_l\}$  d'un opérateur est appelé **spectre de l'opérateur**.

### 3.3.6 Observables :

#### a) Définition

Un opérateur hermétique  $\mathbf{A}$ , est un observable si le système orthonormé de ses kets propres forme une base de l'espace des états  $E$ .

Théorème 1

Les valeurs propres d'un opérateur hermétique sont réelles

Démonstration

L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\mathbf{A}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle \quad [3.73]$$

or

$$\langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \mathbf{A}^\dagger | \psi \rangle^* = \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle^* \quad [3.74]$$

$\Rightarrow \langle \psi | \mathbf{A} | \psi \rangle \in \mathcal{R}$

et  $\langle \psi | \psi \rangle \in \mathcal{R}^+$ , d'où la valeur propre  $\lambda$  est nécessairement réelle.

Théorème 2

Deux kets propres d'un opérateur hermétique, correspondant à deux valeurs propres différentes, sont orthogonaux.

Démonstration

Soient  $|\psi\rangle$  et  $|\phi\rangle$  deux kets propres d'un opérateur hermétique  $\mathbf{A}$ , associés respectivement aux valeurs propres  $\lambda$  et  $\mu$  [ $\lambda \neq \mu$ ].

On a  $\langle\phi|\mathbf{A}|\psi\rangle = \lambda\langle\phi|\psi\rangle = \mu\langle\phi|\psi\rangle$  [car  $\mu$  réelle]

D'où  $(\lambda - \mu)\langle\phi|\psi\rangle = 0 \implies \langle\phi|\psi\rangle = 0$  car  $\lambda \neq \mu$ .

Théorème 3

Si deux opérateurs  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  commutent,  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$ , et si  $|\psi\rangle$  est un ket propre de  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}|\psi\rangle$  est aussi ket propre de  $\mathbf{A}$  associé à la même valeur propre  $\lambda$ .

Démonstration

En effet, comme  $\mathbf{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$  alors :

$$\mathbf{A}(\mathbf{B}|\psi\rangle) = \mathbf{A}\mathbf{B}|\psi\rangle = \mathbf{B}\mathbf{A}|\psi\rangle = a(\mathbf{B}|\psi\rangle)$$

Théorème 4

Si deux opérateurs  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  commutent, on peut construire une base orthonormée de l'espace des états constituée par des kets propres communs à  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ .

Démonstration

Soit  $\mathbf{A}$  une observable, alors il existe un système  $|u_n\rangle$  orthonormé de kets propres de  $\mathbf{A}$  formant une base de l'espace des états  $E$ .

Comme  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$  commutent,  $|u_n\rangle$  et  $\mathbf{B}|u_n\rangle$  sont des kets propres de  $\mathbf{A}$  associés à la même valeur propre  $a_n$ .

i) *1<sup>er</sup> cas* :  $a_n$  est une valeur propre simple (non dégénérée)  
 $\mathbf{B}|u_n\rangle$  est orthogonal à tout ket de la base  $|u_n\rangle$  autre que  $|u_n\rangle$  (d'après *théorème 2*).  
 Donc  $\mathbf{B}|u_n\rangle$  est nécessairement colinéaire à  $|u_n\rangle$  :  $|u_n\rangle$  est donc ket propre commun à  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ .

ii) *2<sup>ème</sup> cas* :  $a_n$  est une valeur propre dégénérée  
 On note  $E_n$  le sous espace propre associé à  $a_n$  ( $A$  est une matrice diagonale dans  $E_n$ ) et  $g_n$  sa dimension.

On diagonalise la restriction de la matrice associée à  $\mathbf{B}$  dans le sous-espace  $E_n$ .  
 Les kets propres de  $\mathbf{B}$ ,  $|v_n^i\rangle_{i=1,\dots,g_n}$ , dans  $E_n$  sont aussi kets propres de  $\mathbf{A}$ . Ce sont des kets propres communs à  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ .

### 3.3.7 Ensembles Complets d'Observables qui commutent (ECOC)

#### a) Définition

Un ensemble d'observables  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$  est appelé *ensemble complet d'observables qui commutent* si et seulement si :



- toutes les observables  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$  commutent deux à deux;
- la donnée des valeurs propres de tous les opérateurs  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$  suffit à déterminer un ket propre commun unique (à un facteur multiplicatif près).

Autrement dit, un ensemble d'observables  $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \dots$  est un ECOC s'il existe une base formée de vecteurs propres communs et si cette base est unique.

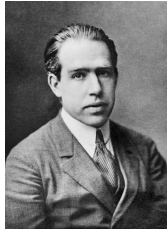
Exemple :

- i) L'observable position  $\mathbf{X}$  est un ECOC,  
En effet, pour toute valeur propre  $x$ , il existe un seul ket propre  $|x\rangle$ , tel que :  
 $\mathbf{X}|x\rangle = x|x\rangle$ .
- ii) Pour une observable  $\mathbf{A}$  quelconque vérifiant l'équation aux valeurs propres suivante :  
 $\mathbf{A}|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$ , nous distinguons deux cas :
  1.  $a_n$  est une valeur propre "non dégénérée", alors la donnée de  $a_n$  détermine de façon unique le ket propre  $|u_n\rangle$ . Par conséquent  $\mathbf{A}$  est un ECOC.
  2. si au moins l'une des valeurs propres  $a_n$  est "dégénérée", alors  $\mathbf{A}$  n'est pas un ECOC.

Dans ce cas, prenons une autre observable  $\mathbf{B}$  qui commute avec  $\mathbf{A}$  :  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$ , et construisons une base orthonormée de kets propres communs à  $\mathbf{A}$  et  $\mathbf{B}$ . Si à chacun des couples  $(a_n, b_p)$  possibles des valeurs propres, correspond un seul ket propre de la base, alors  $\mathbf{A}, \mathbf{B}$  est un ECOC [ $\mathbf{A}|v_{n,p}\rangle = a_n|v_{n,p}\rangle$  et  $\mathbf{B}|v_{n,p}\rangle = b_p|v_{n,p}\rangle$ ].



# 4. Postulats de la Mécanique Quantique



Quiconque n'est pas choqué par la théorie quantique ne la comprend pas.

— Niels Bohr

## 4.1 Description classique d'un système matériel

Dans le contexte classique, on peut décrire un système matériel comme suit :

- a– L'état dynamique d'un système à un instant  $t$  fixé est défini en mécanique classique par la donnée de  $N$  coordonnées généralisées  $q(t)$  et de  $N$  moments conjugués  $p(t)$ .
- b– À l'instant  $t$  donné, la valeur des diverses grandeurs physiques est parfaitement déterminée lorsqu'on connaît l'état du système à cet instant : on peut donc prédire de façon certains le résultat d'une mesure quelconque effectuée à l'instant  $t$ .
- c– L'évolution dans le temps de l'état du système est donnée par les équations de Hamilton-Jacobi :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{et} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad [4.1]$$

où

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad [4.2]$$

$L = E - V$  et  $H = E + V$  sont respectivement le lagrangien et l'hamiltonien du système étudié.

Ainsi, l'état du système à l'instant ultérieur à  $t$  est prédit de façon unique si l'on connaît son état à l'instant  $t$ .

## 4.2 Description quantique

### 4.2.1 Les Postulats

**Postulat 1**

À un instant  $t$ , l'état du système physique est défini par la donnée d'un vecteur ket  $|\psi(t)\rangle$  appartenant à l'espace des états  $E$ .

**Postulat 2**

Toute grandeur physique mesurable  $\mathcal{A}$  est décrite par un opérateur hermitique  $\mathbf{A}$  agissant dans  $E$ . L'opérateur  $\mathbf{A}$  est une observable.

À noter la différence fondamentale en mécanique quantique entre l'état du système et les grandeurs physiques qui lui sont associées.

**Postulat 3**

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

L'ensemble des valeurs propres  $\{a_n\}$  est appelé : le spectre de l'observable  $A$ .

**Postulat 4**

Lorsqu'on mesure une grandeur physique  $\mathcal{A}$  associée à un système se trouvant dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  normé, la probabilité  $P(a_n)$  d'obtenir comme résultat la valeur propre discrète  $a_n$  de l'observable  $A$  correspondante est égale à :

$$P(a_n) = \sum_{i=1} \left| \langle u_n^i | \psi(t) \rangle \right|^2 \quad (4.3)$$

où  $\{|u_n^i\rangle\}_{i=1, \dots, g_n}$  forment une base orthonormée dans le sous-espace  $E_n$  associé à la valeur propre  $a_n$  de  $A$ .

Remarques :

i) si  $|\psi(t)\rangle$  est non normé, nous avons :

$$P(a_n) = \frac{1}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} \sum_{i=1} \left| \langle u_n^i | \psi(t) \rangle \right|^2 \quad (4.4)$$

ii) Dans le cas d'un spectre continu, le 4<sup>ème</sup> postulat s'énonce comme suit :  
Lorsqu'on mesure une grandeur physique  $\mathcal{A}$  associée à un système se trouvant dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  normé, la probabilité  $dP(\alpha)$  d'obtenir un résultat compris entre  $\alpha$  et  $\alpha + d\alpha$  est égale à :

$$dP(\alpha) = \left| \langle v_\alpha | \psi(t) \rangle \right|^2 d\alpha \quad (4.5)$$

où  $v_\alpha$  est le vecteur propre correspondant à la valeur propre  $\alpha$  de l'observable  $A$  associée à la grandeur physique  $\mathcal{A}$ .

**Postulat 5**

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

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t) |\psi(t)\rangle \quad [4.6]$$

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

**4.2.2 Conservation de la norme**

L'opérateur  $H$  étant hermitique, l'équation [4.6] implique la conservation de la norme du vecteur d'état au cours du temps.

Démonstration :

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[ \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right]$$

Or, d'après l'équation [4.6], on a :

$$\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \quad \text{et} \quad \frac{d\langle \psi(t) |}{dt} = \frac{-1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H^\dagger(t) = \frac{-1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t)$$

Donc

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{-1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) | \psi(t) \rangle = 0$$

Donc :  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle$  est constante dans le temps.

**4.2.3 Résolution de l'équation de Schrödinger**

On suppose que le spectre de  $H$  est discret et non dégénéré, et on désigne par  $E_n$  ses énergies propres et par  $|\phi_n\rangle$  les vecteurs propres associés :

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad , \quad n \in \mathbb{N} \quad [4.7]$$

Le système est supposé conservatif, c'est-à-dire  $H$  ne dépend pas du temps, par conséquent  $E_n$  et  $|\phi_n\rangle$  sont indépendants du temps.

Les vecteurs propres  $|\phi_n\rangle$  forment une base orthonormée complète de  $E$ , par conséquent le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle \quad \text{avec} \quad c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t) \rangle \quad [4.8]$$

Projetons l'équation de Schrödinger [4.6] sur les vecteurs  $|\phi_n\rangle$  :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \phi_n | \psi(t) \rangle = \langle \phi_n | H | \psi(t) \rangle = E_n \langle \phi_n | \psi(t) \rangle \implies i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t)$$

d'où

$$c_n(t) = c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)}$$

Donc

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |\phi_n\rangle$$

Ainsi, si l'on connaît le vecteur d'état à un instant initial  $t_0$ , alors on pourra déterminer le vecteur d'état à tout instant ultérieur.

#### 4.2.4 L'opérateur d'évolution

Énoncé :

Il existe un opérateur dit opérateur d'évolution et noté  $U(t, t_0)$  qui permet d'obtenir l'état du système  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$  connaissant son état  $|\psi(t_0)\rangle$  à l'instant  $t_0$  :

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

- i) Si le système est conservatif, l'hamiltonien du système ne dépend pas du temps et l'on a :

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

- ii) Si  $|\psi_i\rangle$  est un vecteur propre de  $H$  associé à l'énergie propre  $E_i$ , alors :

$$U(t, t_0) |\psi_i\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} |\psi_i\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_i} |\psi_i\rangle$$

- iii) Comme l'hamiltonien  $H$  étant hermitique, donc l'opérateur  $U$  est unitaire

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} \implies U^\dagger(t, t_0) = e^{+\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} \implies U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$$

- iv) L'opérateur  $U$  conserve la norme du vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  au cours du temps.

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger U | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \text{constante}$$

#### Postulat 6

L'état du système immédiatement après la mesure de la grandeur physique est la projection normée,  $|\psi'\rangle$ , de l'état initial  $|\psi\rangle$  sur le sous-espace propre associé à  $a_n$ .  
Autrement dit :

$$|\psi'\rangle = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad (4.9)$$

où  $P_n = \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$  est l'opérateur projecteur sur le sous-espace propre associé à  $a_n$ .

Deux cas à distinguer :

- 1<sup>er</sup> cas : la valeur propre  $a_n$  est non dégénérée

$$\mathbf{P}_{a_n} = |a_n\rangle \langle a_n| \implies |\psi'\rangle = |a_n\rangle$$

- 2<sup>ème</sup> cas : la valeur propre  $a_n$  est  $g_n$ -fois dégénérée

$$\mathbf{P}_{a_n} = \sum_{k=1}^{g_n} |a_{n,k}\rangle \langle a_{n,k}| \implies |\psi'\rangle = \sum_{k=1}^{g_n} b_{n,k} |a_{n,k}\rangle$$

Alors l'état du système immédiatement après la mesure est une combinaison linéaire des vecteurs propres associés à la valeur propre  $a_n$ .

### 4.2.5 Principe de correspondance

#### Description classique

Position  $r(x, y, z)$

Impulsion  $p(p_x, p_y, p_z)$

Grandeur physique  $A(r, p, t)$

#### Description classique

$\mathbf{R}(X, Y, Z)$

$\mathbf{P}(P_x, P_y, P_z)$

Observable  $\mathbf{A}(\mathbf{R}, \mathbf{P}, t)$

### 4.2.6 Valeur moyenne d'une observable

Définition : La valeur moyenne de l'observable  $A$  dans l'état normé  $|\psi(t)\rangle$ , noté  $\langle A \rangle$ , est définie comme la moyenne statistique des résultats obtenus en effectuant un grand nombre  $N$  de mesures de cette observable sur des systèmes dans le même état  $|\psi(t)\rangle$ . elle est définie par :

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n) \quad [4.10]$$

où  $a_n$  sont les valeurs propres de  $A$  et  $P(a_n)$  représente la probabilité de trouver la valeur  $a_n$  au cours d'une mesure de  $A$ .

Propriété : On montre que la valeur moyenne  $\langle A \rangle$  peut être également s'écrire :

$$\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \quad [4.11]$$

Démonstration :

Sur  $N$  mesures, on obtient  $N(a_n)$  fois la valeur propre  $a_n$ .

D'après le postulat 4,

$$P(a_n) = \sum_{i=1} | \langle u_n^i | \psi(t) \rangle |^2 \quad \text{et} \quad A | u_n^i \rangle = a_n | u_n^i \rangle, \quad [4.12]$$

d'où

$$\langle A \rangle = \sum_n \sum_i \langle \psi | A | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \langle \psi | A | \left( \sum_n \sum_i | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \right) | \psi \rangle \quad [4.13]$$

or comme

$$\sum_n \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i| = 1, \quad [4.14]$$

alors :  $\langle A \rangle = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$ .

Remarque :

Si l'état  $|\psi(t)\rangle$  n'est pas normé, alors  $\langle A \rangle$  deviendra,

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle}{\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle} \quad [4.15]$$

### 4.2.7 Écart quadratique moyen

Définition : L'écart quadratique moyenne est égal à la racine carré de la moyenne des carrés des écarts :

$$\begin{aligned} \Delta A &= \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle} = \left( \langle A^2 \rangle + \langle A \rangle^2 - 2\langle A \rangle \langle A \rangle \right)^{1/2} \\ &= \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right)^{1/2} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} \end{aligned} \quad [4.16]$$

### 4.2.8 Relation d'incertitude de Heisenberg

Considérons deux observables A et B conjuguées ( $[A, B] = i\hbar$ ). Quelque soit l'état du système étudié,  $\Delta A$  et  $\Delta B$  satisfont à la relation suivante :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} \quad [4.17]$$

Démonstration :

Soient,  $\Delta A = \left( \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \right)^{1/2}$  et  $\Delta B = \left( \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 \right)^{1/2}$ .

Posons :

$$\hat{A} = A - \langle A \rangle \mathbf{1} \quad \text{et} \quad \hat{B} = B - \langle B \rangle \mathbf{1} \quad [4.18]$$

alors :  $(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle$  et  $(\Delta B)^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle$ ,

Puis utilisons l'inégalité de Schwartz :

$$|\langle x | y \rangle|^2 \leq \langle x | x \rangle \langle y | y \rangle \quad [4.19]$$

avec  $|x\rangle = \hat{A} |u\rangle$  et  $|y\rangle = \hat{B} |u\rangle$ , où  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  sont hermitiques.

Alors,

$$\begin{aligned} |\langle u | \hat{A} \hat{B} | u \rangle|^2 &\leq \langle u | \hat{A}^2 | u \rangle \langle u | \hat{B}^2 | u \rangle \\ |\langle \hat{A} \hat{B} \rangle|^2 &\leq \langle \hat{A} \rangle^2 \langle \hat{B} \rangle^2 \end{aligned} \quad [4.20]$$



Ensuite en décomposant en une partie hermitique  $\frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2}$  et en une autre anti-hermitique  $\frac{\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}}{2} = \frac{i\hbar}{2}$ , puis en écrivant

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) - (B - \langle B \rangle)(A - \langle A \rangle) \\ &= AB - BA - A\langle B \rangle - \langle A \rangle B + B\langle A \rangle + A\langle B \rangle \\ &= [A, B] = i\hbar, \end{aligned} \quad [4.21]$$

Ainsi,

$$|\langle \hat{A}\hat{B} \rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{i\hbar}{2} \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle \right|^2 + \frac{\hbar^2}{4} \leq \langle \hat{A} \rangle^2 \langle \hat{B} \rangle^2 = (\Delta A)^2 (\Delta B)^2, \quad [4.22]$$

d'où,  $\Delta A \Delta B \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Cas particulier :  $\vec{R}$  et  $\vec{P}$

Comme  $[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}$ , alors :

$$\begin{aligned} \Delta x \Delta P_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta y \Delta P_y &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \Delta z \Delta P_z &\geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned}$$

ces équations représentent les Relations d'Incertitude de Heisenberg.

### 4.2.9 Équation de Schrödinger des systèmes conservatifs

Définition : un système physique est dit conservatif si son hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps.

Soit  $\{|\phi_n\rangle\}$  une base de vecteurs propres attachée à l'observable  $H$  :

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad [4.23]$$

$|\phi_n\rangle$  et  $E_n$  sont indépendants du temps.

La connaissance de  $|\phi_n\rangle$  et  $E_n$  permet de déterminer l'évolution au cours du temps d'un état quelconque  $|\psi(t)\rangle$ . En effet, en recourant à la décomposition,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle, \quad \text{avec} \quad c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t) \rangle \quad [4.24]$$

puis en considérant l'équation de Schrödinger, on a :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \phi_n | \psi(t) \rangle = \langle \phi_n | H | \psi(t) \rangle \iff i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t), \quad [4.25]$$

d'où,

$$\begin{aligned} c_n(t) &= c_n(t=0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)} \\ \psi(t) &= \sum_n c_n(t=0) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)} |\phi_n\rangle \end{aligned} \quad [4.26]$$

Ainsi, la donnée des conditions initiales  $c_n(t)$  de  $|\phi\rangle$  et  $E_n$  permettent de déterminer l'état du système.

### 4.2.10 Évolution de la valeur moyenne d'une observable : Théorème d'Ehrenfest

La valeur moyenne de l'observable  $A(t)$  dans l'état normé  $|\psi(t)\rangle$  d'un système est définie par,

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle. \quad [4.27]$$

Son évolution dans le temps est décrite par l'équation suivante :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad [4.28]$$

Démonstration :

On a :

$$\frac{d}{dt} \left( \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \right) = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \left( \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) + \left( \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} A | \psi(t) \rangle \right) \quad [4.29]$$

Comme :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle &= + \frac{1}{i\hbar} H(t) | \psi(t) \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | &= - \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H(t) \end{cases}$$

on obtient l'équation d'évolution de la valeur moyenne d'une observable  $A$

$$\frac{d}{dt} \left( \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle \right) = \frac{1}{i\hbar} \langle AH(t) - H(t)A \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} A | \psi(t) \rangle \quad [4.30]$$

Donc :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad [4.31]$$

L'évolution dans le temps de  $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$  [4.31] provient de deux termes différents : le premier est lié à la non-commutation de l'observable avec l'Hamiltonien  $H$  du système, alors que le second représente la dépendance *explicite* de l'observable  $A(t)$  en fonction de la variable  $t$ . Si  $A(t)$  ne dépend pas explicitement du temps, alors  $\partial A / \partial t = 0$  et la relation précédente se réduit à :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle \quad [4.32]$$

Si en plus l'observable  $A$  commute avec l'Hamiltonien  $H$ , alors

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = 0 \quad [4.33]$$

on dit dans ce cas que  $A$  est une *constante du mouvement*. Les résultats des mesures de  $A$  ne dépendent pas du temps.

Le théorème d'Ehrenfest permet d'établir le lien entre la mécanique quantique et mécanique classique par l'intermédiaire des variables positions et impulsions.

L'application de l'équation d'évolution d'une observable à  $\vec{R}$  et  $\vec{P}$  conduit à :

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{R}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{R}, H(t)]\rangle + \left\langle\frac{\partial\vec{R}}{\partial t}\right\rangle \quad [4.34]$$

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{P}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{P}, H(t)]\rangle + \left\langle\frac{\partial\vec{P}}{\partial t}\right\rangle \quad [4.35]$$

$\left\langle\frac{\partial\vec{R}}{\partial t}\right\rangle$  et  $\left\langle\frac{\partial\vec{P}}{\partial t}\right\rangle$  sont nuls car ces opérateurs ne dépendent du temps que de façon implicite.  
Or, comme,

$$[\vec{R}, H] = \left[\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(V(\vec{R}))\right] = \left[\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m}\right] \quad [4.36]$$

$$[\vec{P}, H] = \left[\vec{P}, \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(V(\vec{R}))\right] = \left[\vec{P}, V(\vec{R})\right] \quad [4.37]$$

l'équation [4.37] se simplifie si on se sert de la relation :

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

et devient,

$$\left[\vec{R}, \frac{\vec{P}^2}{2m}\right] = +i\frac{\hbar}{m}\vec{P} \quad [4.38]$$

D'autre part d'après la définition de l'opérateur  $\vec{P}$  dans la représentation  $|r\rangle$ , l'équation [4.38] s'écrit

$$\left[\vec{P}, V(\vec{R})\right] = -i\hbar\vec{\nabla}V(\vec{R}) \quad [4.39]$$

Finalement, nous obtenons les relations suivantes :

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{R}\rangle = \frac{1}{m}\langle\vec{P}\rangle \quad [4.40]$$

$$\frac{d}{dt}\langle\vec{P}\rangle = -\langle\vec{\nabla}V(\vec{R})\rangle \quad [4.41]$$

qui sont les expressions du théorème d'Ehrenfest. Elles ont une forme similaire aux équations de la mécanique classique, en particulier celles d'Hamilton-Jacobi [4.1].

## 4.3 Exemples d'application

### 4.3.1 Exemple 1 : Application des postulats de la mesure

On considère un système physique  $S$  dont l'espace des états, à trois dimensions, est rapporté à la base orthonormée complète formée par les trois kets  $\mathcal{B} = \{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ . On considère l'énergie totale et deux autres grandeurs physiques  $A$  et  $B$  associées au système. Les observables quantiques associées à ces grandeurs sont respectivement l'hamiltonien  $H$  et les deux observables  $A$  et  $B$ . Elles sont définies par leurs actions sur les vecteurs de la base :

$$\begin{aligned} H|u_1\rangle &= \hbar\omega|u_1\rangle, & H|u_2\rangle &= 2\hbar\omega|u_2\rangle, & H|u_3\rangle &= \hbar\omega|u_3\rangle \\ A|u_1\rangle &= a|u_1\rangle, & A|u_2\rangle &= a|u_3\rangle, & A|u_3\rangle &= a|u_2\rangle \\ B|u_1\rangle &= b|u_2\rangle, & B|u_2\rangle &= b|u_1\rangle, & B|u_3\rangle &= b|u_3\rangle. \end{aligned}$$

où :  $a$ ,  $b$  et  $\omega_0$  sont des constantes réelles positives. À l'instant  $t = 0$ , le système est dans l'état initial :

$$|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$$

- 1) Donner l'expression normalisée du vecteur  $|\psi(0)\rangle$ .
- 2) Écrire les matrices représentant les observables  $H$ ,  $A$  et  $B$  dans la base  $\mathcal{B}$ .
- 3) On mesure, à l'instant  $t = 0$ , l'énergie du système.
  - a) Quelles valeurs peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
  - b) Calculer la valeur moyenne de l'énergie  $\langle H \rangle_0 = \langle \psi(0)|A|\psi(0)\rangle$ .
  - c) Calculer l'écart quadratique moyen  $\Delta H$
- 4) Au lieu de mesurer l'énergie du système à l'instant  $t = 0$ , on mesure la grandeur  $A$ .
  - a) Quelles résultats peut-on trouver et avec quelles probabilités ?
  - b) Quel est le vecteur d'état immédiatement après la mesure ?
- 5) Exprimer le vecteur d'état  $\psi(t)$  du système à l'instant  $t$ .
- 6) Calculer les valeurs moyennes  $\langle A \rangle_t$  et  $\langle B \rangle_t$  des observables  $A$  et  $B$  à l'instant  $t$ .  
Conclure.
- 7) Quels résultats obtient-on si l'on mesure à l'instant  $t$  l'observable  $A$  ? Même question pour l'observable  $B$ . Interprétation.

### 4.3.2 Solution 1

- 1) **Expression normalisée du vecteur  $|\psi(0)\rangle$  :**

Calculons le carré de la norme du vecteur  $|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|u_3\rangle$  :

$$\langle \psi(0)|\psi(0)\rangle = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 2$$

Donc l'expression normalisée du vecteur est :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle} \left( |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |u_3\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle$$

2] **Les matrices représentant les observables  $H$ ,  $A$  et  $B$  dans la base  $\mathcal{B}$  sont :**

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} ; A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} ; B = \begin{pmatrix} 0 & b & 0 \\ b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix}$$

où :  $a$ ,  $b$  et  $\omega_0$  sont des constantes réelles positives.

3] **À l'instant  $t = 0$ , le système est dans l'état initial :**

$$|\psi(0)\rangle = |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |u_3\rangle$$

On mesure, à l'instant  $t = 0$ , l'énergie du système.

a) - **Les résultats possibles :**

sont les valeurs propres de l'hamiltonien  $H$ , c'est-à-dire :  $\hbar\omega_0$  et  $2\hbar\omega_0$ .

- **Les probabilités associées :**

à la valeur propre  $\hbar\omega_0$  est associé le vecteur propre  $|u_1\rangle$ , donc :

$$P(\hbar\omega_0) = |\langle u_1 | \psi(0) \rangle|^2 = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = \frac{1}{2}$$

à la valeur propre  $2\hbar\omega_0$  sont associés les vecteurs propres  $|u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$ , donc :

$$P(2\hbar\omega_0) = |\langle u_2 | \psi(0) \rangle|^2 + |\langle u_3 | \psi(0) \rangle|^2 = \left( \frac{1}{2} \right)^2 + \left( \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{2}$$

b) **La valeur moyenne de l'énergie  $\langle H \rangle_0 = \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle :$**

Méthode [1] :

$$\langle H \rangle_0 = \langle \psi(0) | H | \psi(0) \rangle = \sum_{i=1}^3 E_i P(E_i) = \hbar\omega_0 \times \frac{1}{2} + 2\hbar\omega_0 \times \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \hbar\omega_0$$

Méthode [2] :

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_0 &= \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &= \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{2} \hbar\omega_0 \end{aligned}$$

c) **L'écart quadratique moyen** :  $\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2}$

- Moyenne de  $H^2$

$$\begin{aligned}\langle H^2 \rangle_0 &= (\hbar\omega_0)^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ &= (\hbar\omega_0)^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{5}{2}(\hbar\omega_0)^2\end{aligned}$$

- L'écart quadratique moyen  $\Delta H$  :

$$\Delta H = \sqrt{\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2} = \sqrt{\frac{5}{2}(\hbar\omega_0)^2 - \frac{9}{4}(\hbar\omega)^2} \implies \Delta = \frac{\hbar\omega_2}{2}$$

4) **Au lieu de mesurer l'énergie du système à l'instant, on mesure la grandeur A.**

a) **Résultats possibles et leurs probabilités :**

Il faut commencer par déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de l'observable A.

Les valeurs propres de A

$$\text{Det}(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a - \lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} \implies (a - \lambda)^2(\lambda + a) = 0$$

Donc, les valeurs propres de A sont :  $\lambda = a$  [valeur propre deux fois dégénérée] et  $\lambda = -a$  [valeur propre simple].

Les vecteurs propres de A

On constate que  $A|u_1\rangle = |u_1\rangle$ , donc  $|v_1\rangle = |u_1\rangle$  est le premier vecteur propre associé à  $a$ .

On cherche  $|v_2\rangle = x|u_1\rangle + y|u_2\rangle + z|u_3\rangle$  vecteur propre de A associé à la valeur propre  $a$  tel que :

$$A|v_2\rangle = a|v_2\rangle, \quad \langle v_1|v_2\rangle = 0, \quad \langle v_2|v_2\rangle = 1$$

- $A|v_2\rangle = a|v_2\rangle \implies \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax \\ az \\ ay \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ax \\ ay \\ az \end{pmatrix} \implies \begin{cases} x \\ y = z \end{cases}$
- $\langle v_1|v_2\rangle \implies |u_1\rangle\langle v_2| = x = 0$

- $\langle v_2|v_2\rangle = 1 = |x|^2 + |y|^2 + |z|^2 = z|y|^2 \implies |y| = \frac{1}{\sqrt{2}} \implies y = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$ , avec  $e^{i\theta}$  est un facteur de phase qu'on peut prendre égal à 1, donc :

$$|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle + |u_3\rangle]$$

De même, on cherche le vecteur  $|v_3\rangle = x|u_1\rangle + y|u_2\rangle + z|u_3\rangle$  associé à la valeur propre tel que :  $A|v_3\rangle = -a|v_3\rangle$ ,  $\langle v_1|v_3\rangle = 0$ ,  $\langle v_3|v_3\rangle = 1$  on obtient :

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle - |u_3\rangle]$$

### **Conclusion**

Les vecteurs propres associés à la valeur  $a$  sont :

$$|v_1\rangle = |u_1\rangle \text{ et } |v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle + |u_3\rangle]$$

Le vecteur propre associé à la valeur propre  $-a$  est :

$$|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_2\rangle - |u_3\rangle]$$

Alors, en mesurant l'observable  $A$

- ★ Les résultats possibles sont les valeurs propres de l'observable  $A$  c'est-à-dire :  $a$  et  $-a$ .
- ★ Les probabilités associées
  - à la valeur propre  $a$  sont associés les vecteurs propres  $|v_1\rangle = |u_1\rangle$  et  $|v_2\rangle$ , donc :

$$P(a, 0) = |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle v_2|\psi(0)\rangle|^2$$

Or

$$\begin{aligned} \langle u_1|\psi(0)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle v_2|\psi(0)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle u_2| + \langle u_3|] \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \quad [4.42]$$

Donc:

$$P(a, 0) = |\langle u_1|\psi(0)\rangle|^2 + |\langle v_2|\psi(0)\rangle|^2 = \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 + \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right)^2 = 1$$

- à la valeur propre  $-a$  est associé le vecteur propre  $|v_3\rangle$ , donc :

$$P(-a, 0) = |\langle v_3 | \psi(0) \rangle|^2$$

comme précédemment, on a

$$\langle v_3 | \psi(0) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle u_2 | - \langle u_3 |] \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right) = 0$$

Donc:

$$P(-a, 0) = 0$$

**Ou bien :**

$$P(a, 0) + P(-a, 0) = 1 \implies P(-a, 0) = 0$$

**Remarque :** On a obtenu  $P(a, 0) = 1$ . Ce résultat veut dire que lorsqu'on mesure la grandeur  $A$  dans l'état  $|\psi(0)\rangle$ , on obtient certainement la valeur  $a$  : l'état est donc un état propre de l'observable  $A$  associé à la valeur propre  $a$ . En effet :

$$A |\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \implies A |\psi(0)\rangle = a |\psi(0)\rangle$$

b) **Vecteur d'état immédiatement après la mesure :**

Méthode **[1]** :

Avant la mesure, le système était dans l'état propre  $|\psi(0)\rangle$  de  $A$ , donc, après la mesure le système restera dans cet état propre. Ce qui implique que l'état du système immédiatement après la mesure est l'état  $|\psi(0)\rangle$ .

Méthode **[2]** :

On applique le postulat 5 (réduction du vecteur d'état) :

L'état du système immédiatement après la mesure est donnée par la projection orthogonale sur le sous-espace engendré par les vecteurs propres associés à la valeur propre  $a$ . Soit :

$$|\psi'(0)\rangle = \frac{P_a |\psi(0)\rangle}{\sqrt{\langle \psi(0) | P_a | \psi(0) \rangle}}$$

où

$$\begin{aligned} P_a &= |u_1\rangle \langle u_1| + |v_2\rangle \langle v_2| = |u_1\rangle \langle u_1| + \frac{1}{2} (|u_1\rangle + |u_2\rangle) (\langle u_1| + \langle u_2|) \\ &= |u_1\rangle \langle u_1| + \frac{1}{2} |u_2\rangle \langle u_2| + \frac{1}{2} |u_2\rangle \langle u_3| + \frac{1}{2} |u_3\rangle \langle u_2| + \frac{1}{2} |u_3\rangle \langle u_3| \end{aligned}$$



Donc :

$$\begin{aligned}
 P_a |\psi(0)\rangle &= \left( |u_1\rangle \langle u_1| + \frac{1}{2} |u_2\rangle \langle u_2| + \frac{1}{2} |u_2\rangle \langle u_3| + \frac{1}{2} |u_3\rangle \langle u_2| + \frac{1}{2} |u_3\rangle \langle u_3| \right) \\
 &\times \left( \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle. \\
 &\implies P_a |\psi(0)\rangle = |\psi(0)\rangle \implies P_a = \mathbb{1}
 \end{aligned}$$

D'où :

$$|\psi'(0)\rangle = |\psi(0)\rangle$$

### 5) Vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ à l'instant $t$ :

Méthode 1 :

On applique le postulat de l'évolution [postulat 6] qui stipule que le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  évolue dans le temps selon l'équation de Schrodinger :

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

On résout alors cette équation (\*) en tenant compte de l'état initial :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle$$

Posons alors :

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t) |u_1\rangle + c_2(t) |u_2\rangle + c_3(t) |u_3\rangle$$

L'équation (\*) s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 i\hbar \sum_{i=1}^3 \frac{dc_i(t)}{dt} |u_i\rangle &= H (c_1(t) |u_1\rangle + c_2(t) |u_2\rangle + c_3(t) |u_3\rangle) \\
 &= \hbar\omega_0 (|u_1\rangle + c_2(t) |u_2\rangle + c_3(t) |u_3\rangle)
 \end{aligned}$$

En projetant cette équation sur chacun des vecteurs de la base  $\mathbb{B}$ , on obtient le système d'équations suivantes :

$$\begin{cases} i\hbar \dot{c}_1(t) = \hbar\omega_0 c_1(t) \\ i\hbar \dot{c}_2(t) = 2\hbar\omega_0 c_2(t) \\ i\hbar \dot{c}_3(t) = 2\hbar\omega_0 c_3(t) \end{cases} \implies \begin{cases} c_1(t) = c_1(0)e^{-i\omega_0 t} \\ c_2(t) = c_2(0)e^{-2i\omega_0 t} \\ c_3(t) = c_3(0)e^{-2i\omega_0 t} \end{cases}$$

Or :

$$c_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_2(0) = \frac{1}{2}, \quad c_3(0) = \frac{1}{2}$$

Alors :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} |u_1\rangle + \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle + \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle$$

Méthode 2 :

Le vecteur d'état  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$  est obtenu en appliquant l'opérateur d'évolution à l'état  $|\psi(0)\rangle$  :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle$$

L'hamiltonien  $H$  étant indépendant du temps, donc :

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H.t}$$

Ainsi :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H.t} |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}H.t} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} |u_1\rangle + \frac{1}{2} |u_2\rangle + \frac{1}{2} |u_3\rangle \right)$$

Or :  $|u_1\rangle$ ,  $|u_2\rangle$  et  $|u_3\rangle$  sont des vecteurs propres de l'opérateur  $H$  pour les valeurs propres respectives  $\hbar\omega_0$ ,  $2\hbar\omega_0$  et  $2\hbar\omega_0$ . Donc ces vecteurs sont aussi vecteurs propres de l'opérateur qui est une fonction de  $H$  pour les valeurs propres suivantes :  $e^{-i\omega_0 t}$ ,  $e^{-2i\omega_0 t}$  et  $e^{-2i\omega_0 t}$  respectivement.

**Rappel :**

$$A |\varphi_a\rangle = a |\varphi_a\rangle \implies F(A) |\varphi_a\rangle = F(a) |\varphi_a\rangle$$

Donc :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} |u_1\rangle + \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle + \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle$$

6) **Valeur moyenne  $\langle A \rangle_t$  de l'observable  $A$  à l'instant  $t$  :**

Méthode 1 :

calcul direct

$$\langle A \rangle_t = \langle |\psi(t)\rangle | A | |\psi(t)\rangle \rangle$$

Donc :

$$\langle A \rangle_t = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix}$$

Soit:

$$\langle A \rangle_t = a \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix} = a \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \right) = a$$

Donc :

$$\langle A \rangle_t = a = \text{constante}$$

Méthode 2

D'après le théorème d'Ehrenfest, l'évolution de la valeur moyenne d'une observable  $A$  dans le temps est donnée par :

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

On peut vérifier facilement que l'observable  $A$  ne dépend pas explicitement du temps, et qu'elle commute avec l'hamiltonien  $H$  :

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

**L'observable  $A$  est une constante du mouvement.** Donc :

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{d}{dt}\langle |\psi(t)\rangle |A| |\psi(t)\rangle \rangle = 0$$

Ainsi :

$$\langle A \rangle_t = a = \text{constante}$$

$$\langle A \rangle_0 = \langle |\psi(0)\rangle |A| |\psi(0)\rangle \rangle = a \langle |\psi(0)\rangle | |\psi(0)\rangle \rangle = a$$

Car  $|\psi(0)\rangle$  est un état propre de l'observable  $A$  associé à la valeur propre  $a$ .

**Valeur moyenne  $\langle B \rangle_t$  de l'observable  $B$  à l'instant  $t$  :**

On peut vérifier facilement que l'observable  $B$  ne commute pas avec l'hamiltonien  $H$  :  $[H, B] \neq 0$

L'observable  $B$  n'est pas une constante du mouvement. Donc :

$$\frac{d}{dt}\langle B \rangle \neq 0 \implies \langle B \rangle_t \neq \langle B \rangle_{t=0}$$

Calcul de  $\langle B \rangle_t = \langle |\psi(t)\rangle |B| |\psi(t)\rangle \rangle$  :

$$\langle B \rangle_t = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & b & 0 \\ b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix}$$

$$\langle B \rangle_t = a \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} & \frac{1}{2}e^{2i\omega_0 t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \\ \frac{1}{2}e^{-2i\omega_0 t} \end{pmatrix} = \frac{b}{2\sqrt{2}} \left( e^{-i\omega_0 t + i\omega_0 t} \right) + \frac{b}{4}$$

Donc :

$$\langle B \rangle_t = b \left( \frac{\cos \omega_0 t}{\sqrt{2}} + \frac{1}{4} \right)$$

**Conclusion :**

† la valeur moyenne  $\langle A \rangle_t$  est constante dans le temps, car l'observable  $A$  est une constante du mouvement;

† la valeur moyenne  $\langle B \rangle_t$  est une fonction périodique du temps, sa période est  $T = 2\pi/\omega_0$ .

7) **À l'instant  $t$ , on mesure l'observable  $A$**  : Résultats possibles et probabilités correspondantes.

○ Les résultats possibles sont les valeurs propres de l'observable  $A$ , c'est-à-dire :  $a$  et  $-a$ .

○ Les probabilités correspondantes :

La probabilité de trouver la valeur  $a$  :

$$P(a) = |\langle u_1 | \psi(t) \rangle|^2 + |\langle v_2 | \psi(t) \rangle|^2$$

Où :

$$\begin{aligned} \langle u_1 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} \implies |\langle u_1 | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \\ \langle v_2 | \psi(t) \rangle &= \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_2 | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_3 | \right] \times \\ &\quad \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} |u_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} \right) \\ \implies \langle v_2 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Donc :

$$P(a) = |\langle u_1 | \psi(t) \rangle|^2 + |\langle v_2 | \psi(t) \rangle|^2 = 1$$

La probabilité de trouver la valeur  $-a$  :

$$P(-a) = |\langle v_3 | \psi(t) \rangle|^2 = 1 - P(a) = 0$$

Puisque l'observable  $A$  est une constante du mouvement, alors les probabilités de mesure se conservent dans le temps.

**À l'instant  $t$ , on mesure l'observable  $B$**  : Résultats possibles et probabilités correspondantes.

**Il faut commencer par déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de l'observable  $B$ .**

Un calcul similaire à celui effectué dans le cas de l'observable  $A$ , nous donne :

- les valeurs propres de  $B$  sont :  $\lambda_1 = b$  [valeur propre deux fois dégénérée] et  $\lambda_2 = -b$  [valeur propre simple].

- les vecteurs propres associés à la valeur propre  $\lambda_1 = b$  sont :

$$|q_1\rangle = |u_3\rangle \text{ et } |q_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle + |u_2\rangle]$$

- le vecteur propre associé à la valeur propre  $\lambda_2 = -b$  est :

$$|q_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|u_1\rangle - |u_2\rangle]$$

Donc, les résultats possibles sont alors  $b$  et  $-b$ .

- La probabilité de trouver la valeur  $b$  :

$$P(b) = |\langle u_3 | \psi(t) \rangle|^2 + |\langle q_2 | \psi(t) \rangle|^2$$

Où :

$$\begin{aligned} \langle u_3 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-2i\omega_0 t} \implies |\langle u_3 | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{4} \\ \langle q_2 | \psi(t) \rangle &= \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_1 | + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle u_2 | \right] \times \\ &\quad \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} |u_1\rangle + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_2\rangle + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} |u_3\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} \right) \\ \implies \langle q_2 | \psi(t) \rangle &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\omega_0 t} + \frac{1}{2} e^{2i\omega_0 t} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} + \frac{1}{2} e^{-2i\omega_0 t} \right) \\ &= \frac{2}{8} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos(\omega_0 t) \end{aligned}$$

Donc :

$$P(b) = |\langle u_3 | \psi(t) \rangle|^2 + |\langle q_2 | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{5}{8} + \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos(\omega_0 t)$$

- La probabilité de trouver la valeur  $-b$  :

$$P(-b) = 1 - P(b) = |\langle q_3 | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{3}{8} - \frac{1}{2\sqrt{2}} \cos(\omega_0 t)$$

On constate que les probabilités de mesure de l'observable  $B$  sont des fonctions périodiques du temps, puisque l'observable  $B$  n'est pas une constante du mouvement.

### 4.3.3 Exemple 2 : Evolution d'un système dans un champ magnétique [Théorème d'Ehrenfest]

On considère un système physique  $S$  dont l'espace des états, à deux dimensions, est rapporté à la base orthonormée formée par les deux kets  $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$ . Soient les observables  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  définies par leurs actions sur les vecteurs  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  :

$$\begin{aligned} S_x |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |-\rangle, & S_x |-\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle \\ S_y |+\rangle &= \frac{i\hbar}{2} |-\rangle, & S_y |-\rangle &= \frac{i\hbar}{2} |+\rangle \\ S_z |+\rangle &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle, & S_z |-\rangle &= \frac{-\hbar}{2} |-\rangle \end{aligned}$$

1. (a) Ecrire les matrices représentant  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  dans la base  $\mathcal{B}$ .  
(b) Calculer les commutateurs  $[S_x, S_y]$ ,  $[S_y, S_z]$  et  $[S_z, S_x]$ .
2. Le système  $S$  supposé fixe [énergie cinétique nulle], est placé dans un champ magnétique constant parallèle à  $Oz$ ,  $\vec{B} = B\vec{e}_z$ ; l'hamiltonien d'interaction  $H$  du système avec le champ magnétique est alors  $H = \omega S_z$ , où  $\omega$  est une constante réelle. A l'instant  $t = 0$ , le système est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

- (a) Calculer les valeurs moyennes  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  et  $\langle S_z \rangle$  dans l'état  $|\psi(0)\rangle$ .
- (b) Déterminer l'état  $|\psi(t)\rangle$  de la particule à tout instant ultérieur  $t > 0$ .
- (c) Calculer les valeurs moyennes  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  et  $\langle S_z \rangle$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$ .
3. (a) En utilisant le théorème d'Ehrenfest, calculer :  $\frac{d}{dt}\langle S_x \rangle$ ,  $\frac{d}{dt}\langle S_y \rangle$  et  $\frac{d}{dt}\langle S_z \rangle$   
(b) Trouver les équations différentielles de second degré vérifiées par  $\langle S_x \rangle$  et  $\langle S_y \rangle$ . Résoudre ces équations et retrouver le résultat de la question (2-c). En donner une interprétation géométrique.

#### 4.3.4 Solution 2

On considère un système physique  $S$  dont l'espace des états, à deux dimensions, est rapporté à la base orthonormée formée par les deux kets  $\mathcal{B} = \{|+\rangle, |-\rangle\}$

- 1) a) Les matrices représentant  $S_x$ ,  $S_y$  et  $S_z$  dans la base  $\mathcal{B}$  :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

b) **Calcul des commutateurs**  $[S_x, S_y]$ ,  $[S_y, S_z]$  et  $[S_z, S_x]$  : On a :

$$S_x S_y = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}$$

$$S_y S_x = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow [S_x, S_y] = S_x S_y - S_y S_x = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar S_z$$

D'où :

$$\boxed{[S_x, S_y] = i\hbar S_z}$$

De même :

$$\boxed{[S_y, S_z] = i\hbar S_x ; [S_z, S_x] = i\hbar S_y}$$

2) L'hamiltonien d'interaction  $H$  de la particule avec le champ magnétique est :

$$H = \omega S_z, \text{ où } \omega \in \mathbb{R}$$

À l'instant  $t = 0$ , le système est dans l'état :

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

a) **valeurs moyennes**  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  et  $\langle S_z \rangle$  dans l'état  $|\psi(0)\rangle$

$$\star \langle S_x \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 2 \cdot \frac{\hbar}{4} \Rightarrow \boxed{\langle S_x \rangle_0 = \frac{\hbar}{2}}$$

$$\star \langle S_y \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} -i & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (-i + i)$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle S_y \rangle_0 = 0}$$

$$\star \langle S_z \rangle_0 = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (1 - 1)$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle S_z \rangle_0 = 0}$$

b) **Le vecteur d'état**  $|\psi(t)\rangle$  à l'instant  $t$  est obtenu en appliquant l'opérateur d'évolution à l'état  $|\psi(0)\rangle$  :

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle$$

L'hamiltonien  $H$  étant indépendant du temps, donc :

$$\boxed{U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} = e^{-i \frac{\omega t}{\hbar} S_z}}$$

Donc:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{\hbar}S_z} \left( \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \right)$$

Or, les vecteurs  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  sont des vecteurs propres de l'opérateur pour les valeurs propres respectives  $\frac{\hbar}{2}$  et  $-\frac{\hbar}{2}$ .

Donc, ces vecteurs sont aussi vecteurs propres de l'opérateur  $U(t,0)$  pour les valeurs propres suivantes :  $e^{-i\frac{\omega t}{2}}$  et  $e^{i\frac{\omega t}{2}}$  respectivement. Donc :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\frac{\omega t}{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\frac{\omega t}{2}}|-\rangle$$

c) **valeurs moyennes  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  et  $\langle S_z \rangle$  dans l'état  $|\psi(t)\rangle$**

$$\star \langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega t}{2}} & e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ e^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

$$\implies \langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t)$$

$$\star \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega t}{2}} & e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ e^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} i (-e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

$$\implies \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t)$$

$$\star \langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{4} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega t}{2}} & e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ e^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{4} (1 - 1)$$

$$\implies \langle S_z \rangle = 0$$

3) a) **D'après le théorème d'Ehrenfest, l'évolution de la valeur moyenne de l'observable dans le temps est donnée par :**

$$\frac{d}{dt} \langle S_u \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [S_u, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial S_u}{\partial t} \right\rangle$$

Les observables  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$  et  $\langle S_z \rangle$  ne dépendent pas explicitement du temps, alors :

$$\frac{d}{dt} \langle S_u \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [S_u, H] \rangle = \frac{\omega}{i\hbar} \langle [S_u, S_z] \rangle$$



Par conséquent,

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_x \rangle = \frac{\omega}{i\hbar} \langle [\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_z] \rangle = -\frac{\omega}{i\hbar} i\hbar \langle \mathbf{S}_y \rangle = -\omega \langle \mathbf{S}_y \rangle \implies \boxed{\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_x \rangle = -\omega \langle \mathbf{S}_y \rangle} \quad [4.43]$$

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_y \rangle = \frac{\omega}{i\hbar} \langle [\mathbf{S}_y, \mathbf{S}_z] \rangle = \frac{\omega}{i\hbar} i\hbar \langle \mathbf{S}_x \rangle = \omega \langle \mathbf{S}_x \rangle \implies \boxed{\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_y \rangle = \omega \langle \mathbf{S}_x \rangle} \quad [4.44]$$

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_z \rangle = \frac{\omega}{i\hbar} \langle [\mathbf{S}_z, \mathbf{S}_z] \rangle = 0 \implies \boxed{\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_z \rangle = 0} \quad [4.45]$$

L'équation [4.45] montre que la composante reste en moyenne constante :

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_z \rangle = 0 \implies \langle \mathbf{S}_z \rangle = \text{const} = \langle \mathbf{S}_z \rangle_0 \implies \langle \mathbf{S}_z \rangle = 0$$

b) Équations différentielles de second ordre vérifiées par  $\langle \mathbf{S}_x \rangle$  et  $\langle \mathbf{S}_y \rangle$  :

**Dérivons, par rapport au temps, les équations [4.43] et [4.44] :**

$$\langle \mathbf{S}_x \rangle = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t)$$

$$\langle \mathbf{S}_y \rangle = C \cos(\omega t) + D \sin(\omega t)$$

$A$ ,  $B$ ,  $C$  et  $D$  sont des paramètres complexes déterminés à partir des conditions initiales :

$$\langle \mathbf{S}_x \rangle(t=0) = \langle \mathbf{S}_x \rangle_0 = A = \frac{\hbar}{2}, \quad \langle \mathbf{S}_y \rangle(t=0) = \langle \mathbf{S}_y \rangle_0 = C = 0$$

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_x \rangle = -A\omega \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) = -\omega \langle \mathbf{S}_y \rangle \implies B = \langle \mathbf{S}_y \rangle_0 = 0$$

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{S}_y \rangle = -C\omega \sin(\omega t) + D \cos(\omega t) = \omega \langle \mathbf{S}_x \rangle \implies D = \langle \mathbf{S}_x \rangle_0 = \frac{\hbar}{2}$$

D'où :

$$\boxed{\langle \mathbf{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t), \quad \langle \mathbf{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t), \quad \langle \mathbf{S}_z \rangle = 0}$$

On retrouve ainsi les résultats obtenues dans la question [2. c.).

**Interprétation géométrique :**

Ces équations décrivent un mouvement de précession du vecteur  $\langle \vec{\mathbf{S}} \rangle$  de composantes  $\langle \mathbf{S}_x \rangle$ ,  $\langle \mathbf{S}_y \rangle$  et  $\langle \mathbf{S}_z \rangle$  autour du champ magnétique  $\vec{B}$  à la vitesse angulaire  $\omega$ :

$$\boxed{\langle \vec{\mathbf{S}} \rangle = \langle \mathbf{S}_x \rangle \vec{e}_x + \langle \mathbf{S}_y \rangle \vec{e}_y = \frac{\hbar}{2} \cos(\omega t) \vec{e}_x + \frac{\hbar}{2} \sin(\omega t) \vec{e}_y}$$

c) Interpretation physique :

Ce mouvement de précession d'un moment cinétique autour d'un champ magnétique constant est appelé précession de Larmor.



# 5. Oscillateur Harmonique à une dimension



Quiconque n'est pas choqué par la théorie quantique ne la comprend pas.

— Niels Bohr

## 5.1 Étude en mécanique classique

L'hamiltonien classique d'une particule de masse  $m$  dans un puits de potentiel harmonique  $V(x) = m\omega^2 x^2/2$  s'écrit :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (5.1)$$

où  $\omega$  est la pulsation propre de l'oscillateur et  $p = m\dot{x}$  est l'impulsion de la particule. Le mouvement classique de la particule peut être obtenu à partir du principe fondamental de la dynamique

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} \iff \ddot{x} + \omega^2 x = 0,$$

la solution générale de cette équation est

$$x(t) = a \cos(\omega t + \phi)$$

En remplaçant cette solution dans l'expression de l'hamiltonien on obtient

$$H = \frac{1}{2} m a^2 \omega^2$$

qui est une constante du mouvement (le système est conservatif). L'énergie de la particule prend n'importe quelle valeur réelle positive; il y a continuité des valeurs possibles de l'énergie classique de l'oscillateur harmonique.

## 5.2 Étude en mécanique quantique

L'opérateur hamiltonien en mécanique quantique associé à l'énergie mécanique de la particule s'écrit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad (5.2)$$

L'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres de  $H$ .

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (5.3)$$

### 5.2.1 Recherche des valeurs propres de $H$ (énergies)

#### a- Notations :

Introduisons les opérateurs de création  $a^+$  et d'annihilation  $a$  [parfois noté aussi  $a^-$ ] définis par :

$$\begin{aligned} a^+ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \\ a^- &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P = a \end{aligned}$$

À partir de ces deux opérateurs, on définit l'opérateur "Nombre de quanta"  $N = a^+a$ .  
Propriétés :

- $N$  est hermitique
- $[a, a^+] = \mathbb{1}$
- $H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2}\mathbb{1})$

#### Démonstration :

- $N^\dagger = (a^+a)^\dagger = (a)^\dagger(a^+)^\dagger = a^+a = N$ .
- On a :

$$\begin{aligned} N = a^+a &= \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \right) \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \right) \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}X^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}P^2 + i\frac{1}{2\hbar} \underbrace{(XP - PX)}_{=i\hbar} \\ &= \frac{m\omega}{2\hbar}X^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}P^2 - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \left( \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \right) - \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.4)$$

De même,

$$\begin{aligned} N = aa^+ &= \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \right) \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P \right) \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.5)$$

d'où  $[a, a^+] = aa^+ - a^+a = \mathbb{1}$ .

Les expressions de l'hamiltonien quantique de l'oscillateur harmonique :

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

Les vecteurs propres de  $H$  sont les memes que ceux de l'opérateur hermitique  $H$ . Les valeurs propres qui représentent les valeurs possibles de l'énergie d'un oscillateur harmonique se déduisent facilement de celles de  $N$ .

### b- Recherche de valeurs propres de $N$ :

Le probleme de la recherche des valeurs stationnaires de l'énergie totale d'un oscillateur harmonique à une dimension [OH(1)] en mécanique quantique se ramene à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$N |\phi_\nu\rangle = \nu |\phi_\nu\rangle$$

Propriétés :

- les valeurs de  $\nu$  sont réelles et positives
- $a |\phi_0\rangle = 0$
- $Na |\phi_\nu\rangle = (\nu - 1)a |\phi_\nu\rangle$  et  $Na^+ |\phi_\nu\rangle = (\nu + 1)a^+ |\phi_\nu\rangle$
- les valeurs possibles de  $\nu$  sont entiers naturels.

Démonstration :

- on a  $\langle \phi_\nu | a^+ a | \phi_\nu \rangle = \nu \langle \phi_\nu | \phi_\nu \rangle$ .  
Or  $\langle \phi_\nu | \phi_\nu \rangle \geq 0$  et  $\langle \phi_\nu | a^+ a | \phi_\nu \rangle = \|a |\phi_\nu\rangle\|^2 \geq 0 \implies \nu \geq 0$ .
- $\|a |\phi_0\rangle\|^2 = \langle \phi_0 | a^+ a | \phi_0 \rangle = 0 \langle \phi_0 | \phi_0 \rangle = 0$   
d'où  $a |\phi_0\rangle = 0$
- $Na |\phi_\nu\rangle = a^+ a a |\phi_\nu\rangle = (a a^+ - \mathbb{1}) a |\phi_\nu\rangle = (aN - a) |\phi_\nu\rangle = (\nu - 1)a |\phi_\nu\rangle$   
et de meme  $Na^+ |\phi_\nu\rangle = a^+ a a^+ |\phi_\nu\rangle = a^+ (N + \mathbb{1}) |\phi_\nu\rangle = (\nu + 1)a^+ |\phi_\nu\rangle$
- On suppose que  $\nu$  n'est pas un nombre entier naturel. Il existe  $n$  un entier naturel tel que  $n < \nu < n + 1$ .  
On a  $|\phi_\nu\rangle, a |\phi_\nu\rangle, \dots, a^n |\phi_\nu\rangle$  sont des kets propres de  $N$  associés respectivement aux valeurs propres  $\nu, \nu - 1, \dots, \nu - n$  avec  $\nu - n > 0$  [propriété 1].  
De plus,  $a^{n+1} |\phi_\nu\rangle$  est aussi ket propre de  $N$  associé à la valeur propre  $\nu - n - 1$ .  
Ce qui implique que la valeur propre  $\nu - n - 1$  est nécessairement positive. Ceci est en contradiction avec l'hypothèse que  $\nu < n + 1$ .  
D'ù la conclusion que  $\nu$  est un nombre entier naturel.

**c- Valeurs propres de  $H$  :**

Les valeurs stationnaires de l'énergie d'un O.H(1) sont quantifiées. Elles s'écrivent :

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

Remarques :

- ★ L'opérateur  $a$  permet de passer d'un niveau d'énergie  $E_n$  à un niveau d'énergie  $E_{n-1} = E_n - \hbar\omega$  par annihilation d'un quantum d'énergie  $\hbar\omega$ . L'opérateur  $a$  est appelé opérateur *annihilation*.
- ★ L'opérateur  $a^+$  permet de passer d'un niveau d'énergie  $E_n$  à un niveau d'énergie  $E_{n+1} = E_n + \hbar\omega$  par création d'un quantum d'énergie  $\hbar\omega$ . L'opérateur  $a^+$  est appelé opérateur *création*.

**5.2.2 Recherche des kets propres de  $H$** 

Les kets propres  $|\phi_n\rangle$  ( $n$  nombre entier naturel) de  $N$  sont aussi kets propres de  $H$ . L'espace des états est rapporté à la base orthonormée discrète  $\{|\phi_n\rangle\}$ . On montre par récurrence que

$$|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^+|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}(a^+)^n|\phi_0\rangle$$

Démonstration :

Les kets  $|\phi_{n+1}\rangle$  et  $a^+|\phi_n\rangle$  sont tous les deux kets propres de  $N$  associés à la même valeur propre  $n+1$ . Ils sont par conséquent nécessairement colinéaire. On pose dans ce cas  $|\phi_{n+1}\rangle = c_{n+1}a^+|\phi_n\rangle$  où  $c_{n+1}$  est un nombre complexe non nul.

Sachant que  $|\phi_{n+1}\rangle$  est un ket normé, on a :

$$\langle\phi_{n+1}|\phi_{n+1}\rangle = 1 = |c_{n+1}|^2 \langle\phi_n|aa^+|\phi_n\rangle = |c_{n+1}|^2 \langle\phi_n|(N+1)|\phi_n\rangle = |c_{n+1}|^2(n+1)$$

d'où

$$c_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}$$

**5.2.3 Représentation matricielle des opérateurs  $a$ ,  $a^+$ ,  $N$  et  $H$** 

Maintenant on sait que :

$$\begin{aligned} a^+|\phi_n\rangle &= \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle, & a|\phi_{n+1}\rangle &= \sqrt{n+1}|\phi_n\rangle, \\ N|\phi_n\rangle &= n|\phi_n\rangle, & H|\phi_n\rangle &= E_n|\phi_n\rangle. \end{aligned}$$

donc les représentations matricielles de ces opérateurs qu'on va les noter avec  $\widehat{a}^+$ ,  $\widehat{a}$ ,  $\widehat{N}$  et  $\widehat{H}$  s'écrivent:

$$\hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \sqrt{n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & \vdots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & n \end{pmatrix}, \quad \hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_3 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_4 & \vdots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_n \end{pmatrix}.$$





# 1. Annexe A

## 1.1 Densité d'énergie du corps noir en mécanique classique

Cette densité d'énergie s'écrit :

$$u(\nu, T) = \rho(\nu) \langle E \rangle \quad [A1]$$

avec

$$\begin{cases} \rho(\nu) : \text{nombre d'oscillateur harmonique/volume} \\ \langle E \rangle : \text{énergie de chaque oscillateur harmonique} \end{cases}$$

Classiquement parlant, l'énergie varie de manière continue et d'après la physique statistique, le nombre des O.H dont l'énergie comprise entre  $E$  et  $E + dE$  est donné par

$$dN = P(E) dE = a e^{-E/k_B T} dE \quad [A2]$$

avec  $k_B \equiv$  constante de Boltzman,  $T \equiv$  température, et  $P(E) \equiv a e^{-E/k_B T}$  est la probabilité associée à l'énergie  $E$ .

Comme le nombre des O.H par unité de volume,  $\rho(\nu)$  s'écrit

$$\rho(\nu) = \frac{8 \pi \nu^2}{c^3} \quad [A3]$$

on cherche alors  $a$  et  $u(\nu, T)$ . Or, par définition, l'énergie de chaque oscillateur harmonique s'écrit dans le cadre classique par

$$\langle E \rangle = \int_0^{+\infty} E dN = \int_0^{+\infty} P(E) E dE = a \int_0^{+\infty} E e^{-E/k_B T} dE \quad [A4]$$

Intégration par partie simplifie cette valeur moyenne, et donne :

$$\langle E \rangle = a \underbrace{\left[ -k_B T E e^{-E/k_B T} \right]_0^{+\infty}}_{=0} + k_B T a \int_0^{+\infty} e^{-E/k_B T} dE = k_B T \int_0^{+\infty} a e^{-E/k_B T} dE \quad [A5]$$

Or

$$\int_0^{+\infty} a e^{-E/k_B T} dE = 1 \quad \text{probabilité totale égale à 1} \quad [A6]$$

Il s'en suit alors que dans le contexte classique,

$$\langle E \rangle = k_B T = \frac{1}{\beta}$$

et la densité d'énergie du corps noir est :

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot k_B T$$

On remarque que la variation de  $u(\nu, T)$  se comporte comme  $\nu^2$ , ce qui explique bien l'allure expérimentale du corps noir MAIS seulement à faibles fréquences  $\nu$ . À hautes fréquences, la densité d'énergie diverge, et aussi l'énergie totale  $U(T)$

$$U(T) = \int_0^{+\infty} u(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \cdot k_B T \int_0^{+\infty} \nu^2 d\nu \longrightarrow +\infty \quad [A7]$$

ce qui est physiquement inacceptable.

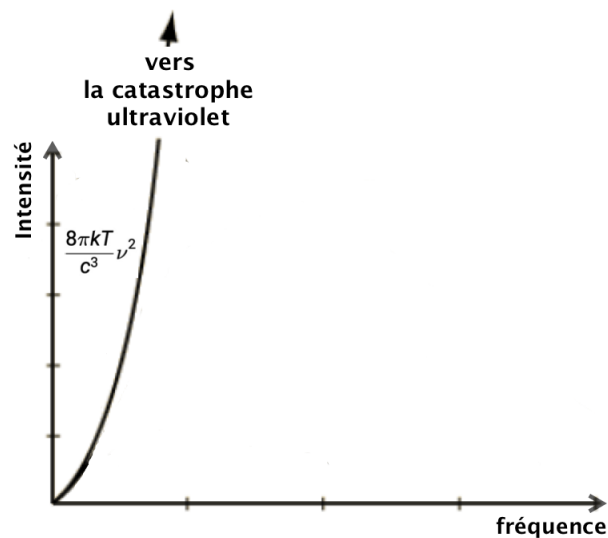


Figure 1.1: Allure théorique du corps noir dans le contexte classique.

## 1.2 Densité d'énergie du corps noir en mécanique quantique

D'après l'hypothèse de Planck, les échanges d'énergies entre la matière du corps noir et le rayonnement électromagnétiques (photons) se font par paquet d'énergie (ou bien quanta d'énergie) égale à  $\epsilon = h\nu$ . Donc l'énergie n'est plus continue mais plutôt discrète et s'écrit :

$$E \longrightarrow E_n = n h \nu$$

Le calcul de l'énergie moyenne devient alors :

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \sum_n E_n P(E_n) = \sum_n a e^{-\beta E_n} E_n \quad \text{avec} \quad k_B T = \beta^{-1} \\ &= \sum_n a e^{-\beta E_n} E_n \quad \text{avec} \quad E_n = n h \nu \\ &= \sum_n n a h \nu e^{-\beta n h \nu}\end{aligned}\tag{A8}$$

avec

$$\sum_n P(E_n) = \sum_n a e^{-\beta n h \nu} = 1 \implies a = \frac{1}{\sum_n e^{-\beta n h \nu}}\tag{A9}$$

Donc

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_n n h \nu e^{-\beta n h \nu}}{\sum_n e^{-\beta n h \nu}} = \frac{N}{D}\tag{A10}$$

Trouvons alors la relation entre le numérateur  $N$  et le dénominateur  $D$ .  
Soit

$$D = \sum_n e^{-\beta n h \nu} = \sum_n \left( e^{-\beta h \nu} \right)^n : \text{ suite géométrique de raison } q = e^{-\beta h \nu} < 1\tag{A11}$$

Mathématiquement, la somme des  $n$  premiers termes d'une suite géométrique de raison  $q$  s'écrit :

$$\sum_n^{\infty} \alpha^n = \frac{1}{1 - \alpha} \quad \forall \alpha < 1\tag{A12}$$

cela donne

$$D = \frac{1}{1 - e^{-\beta h \nu}}\tag{A13}$$

De plus, en regardant l'équation (A11) on remarque que :

$$\frac{dD}{d\beta} = - \sum_n n h \nu e^{-\beta n h \nu} = -N\tag{A14}$$

donc

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= - \frac{1}{D} \frac{dD}{d\beta} = - \frac{d}{d\beta} \ln(D) \\ &= \frac{d}{d\beta} \ln\left(\frac{1}{D}\right) = \frac{d}{d\beta} \ln(1 - e^{-\beta h \nu}) \\ &= \frac{+h \nu e^{-\beta h \nu}}{1 - e^{-\beta h \nu}}\end{aligned}\tag{A15}$$

Finalement

$$\langle E \rangle = \frac{h \nu}{e^{-\beta h \nu} - 1}\tag{A16}$$

À la lumière de ça, la densité d'énergie s'écrit :

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \cdot \frac{h\nu}{e^{-\beta h\nu} - 1} \quad [A17]$$

Par ailleurs, une étude asymptotique de  $u(\nu, T)$  permet de lister les deux points suivants :

- Pour les basses fréquences :

$$h\nu \ll k_B T \Rightarrow e^{\beta h\nu} - 1 \sim \beta h\nu \equiv \frac{h\nu}{k_B T} \Rightarrow u(\nu, T) \sim \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2 \sim \frac{8\pi}{c} \frac{k_B T}{\lambda^2} \quad [A18]$$

la densité d'énergie est identique à l'expression de  $u(\nu, T)$  formulée par Rayleigh et Jeans

- Pour les hautes fréquences :

$$h\nu \gg k_B T \Rightarrow \frac{1}{e^{\beta h\nu} - 1} \sim e^{-\beta h\nu} \Rightarrow u(\nu, T) \sim \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 e^{-\beta h\nu} \sim \frac{8\pi h}{\lambda^3} e^{-\beta hc/\lambda} \quad [A19]$$

on retrouve dans ce cas la loi de déplacement de Wien en annulant la dérivée de  $u(\nu, T)$  par rapport à  $\lambda$  :  $\lambda_{max} T = \text{constante}$ .

Ce résultat théorique est en accord avec les faits expérimentaux.

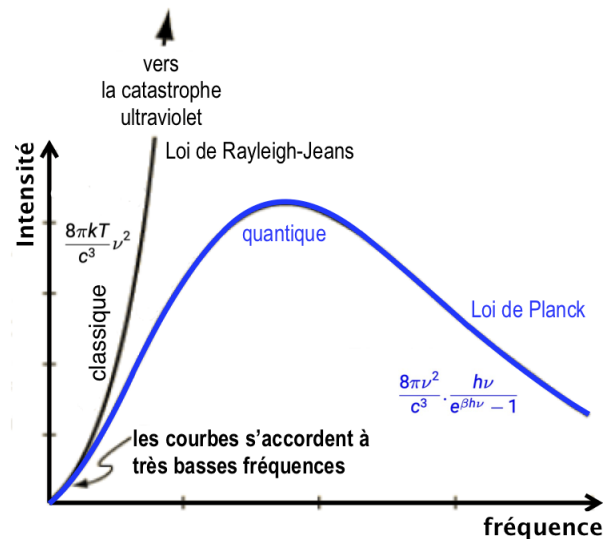


Figure 1.2: Allure théorique du corps noir dans le contexte quantique.

## 1.3 Énergie totale du rayonnement d'un corps noir

L'énergie totale  $U(T)$  selon l'aspect quantique garde la même définition qu'on a vu précédemment dans l'équation [A7]. On écrit :

$$U(T) = \int_0^{+\infty} u(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi}{c^3} \cdot h \int_0^{+\infty} \frac{\nu^3}{e^{-\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu \quad [\text{A20}]$$

Intégration par changement de variable,

$$x = \frac{h\nu}{k_B T} \implies d\nu = \frac{k_B T}{h} dx$$

nous permet d'écrire l'équation [A20] comme suite :

$$U(T) = \frac{8\pi}{c^3} \cdot h \cdot \left(\frac{k_B T}{h}\right)^4 \underbrace{\int_0^{+\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{=\pi^4/15} \quad [\text{A21}]$$

et donc l'expression de l'énergie totale se réduit à :

$$U(T) = \frac{8\pi^5}{15 c^3} \frac{k_B^4}{h^4} T^4 = \sigma T^4 \quad [\text{A22}]$$

qui traduit la loi de Stephan.

## 1.4 Équation de conservation

Considérons l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \quad [\text{A23}]$$

On en déduit :

$$\Delta \psi(\vec{r}, t) = -\frac{2im}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) + \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t) \quad [\text{A24}]$$

L'expression complexe conjuguée est :

$$\Delta \psi^*(\vec{r}, t) = \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\vec{r}, t) + \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}) \psi^*(\vec{r}, t) \quad [\text{A25}]$$

$V(\vec{r})$  étant une grandeur réelle. Posons  $\psi = \psi(\vec{r}, t)$  et  $\psi^* = \psi^*(\vec{r}, t)$ , on écrit

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} \vec{\nabla} \left[ \psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t) - \psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}, t) \right] \quad [\text{A26}]$$

$$= \frac{\hbar}{2im} \left[ \vec{\nabla} \psi^* \cdot \vec{\nabla} \psi + \psi^* (\vec{\nabla}^2 \psi) - \vec{\nabla} \psi \cdot \vec{\nabla} \psi^* - \psi (\vec{\nabla}^2 \psi^*) \right] \quad [\text{A27}]$$

$$= \frac{\hbar}{2im} \left[ \psi^* (\vec{\nabla}^2 \psi) - \psi (\vec{\nabla}^2 \psi^*) \right] \quad [\text{A28}]$$

$$= \frac{\hbar}{2im} \left[ \psi^* \left( -\frac{2im}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{2m}{\hbar^2} V \psi \right) - \psi \left( \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \frac{2m}{\hbar^2} V \psi^* \right) \right] \quad [\text{A29}]$$

soit,

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar}{2im} \frac{2im}{\hbar} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right] = -\frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) \quad [\text{A30}]$$

d'où l'équation de conservation :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 \quad [\text{A31}]$$

Les symboles  $\vec{\nabla} f$  et  $\vec{\nabla} \cdot \vec{j}$  désignent respectivement le gradient et la divergence.

$$\vec{\nabla} f = \frac{\partial f}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial f}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial f}{\partial z} \vec{e}_z \quad [\text{A32}]$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{\partial j_x}{\partial x} + \frac{\partial j_y}{\partial y} + \frac{\partial j_z}{\partial z} \quad [\text{A33}]$$

à une dimension, on a :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(x, t) + \frac{\partial}{\partial x} j_x(x, t) = 0 \quad [\text{A34}]$$

## 1.5 Exemple d'application de l'Effet Tunnel en physique

### Inversion de la molécule d'ammoniac

La molécule d'ammoniac  $\text{NH}_3$  a la forme d'une pyramide assez aplatie (voir la figure 1.3 ci-dessous)

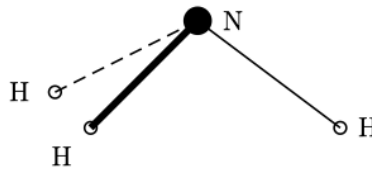


Figure 1.3: Structure de la molécule d'ammoniac.

dont l'atome d'azote occupe le sommet et les trois atomes d'hydrogène forment la base, en forme de triangle équilatéral. Les chimistes s'intéressent, en général, à un mouvement particulier des atomes de cette molécule, dans lequel la molécule possède deux états d'équilibre définis par la position de l'atome d'azote N par rapport à la base, formé par les 3 atomes d'hydrogène. En effet, les liaisons atomiques présentes au sein de la molécule forment un double puits de potentiel qui laisse entrevoir deux minimas et donc deux positions d'équilibre, symétriques.

En imaginant que seul l'azote est mobile, tout en effectuant une masse réduite  $\mu$  qui tient compte de ce mouvement relatif. La forme de la fonction potentielle qui détermine le mouvement de l'azote est représentée sur la figure 1.4 ci-dessous

Du point de vue de la mécanique classique, la molécule ne peut passer d'un état à l'autre. C'est-à-dire que si l'atome d'azote est d'un côté du plan, il y restera puisque celui-ci se

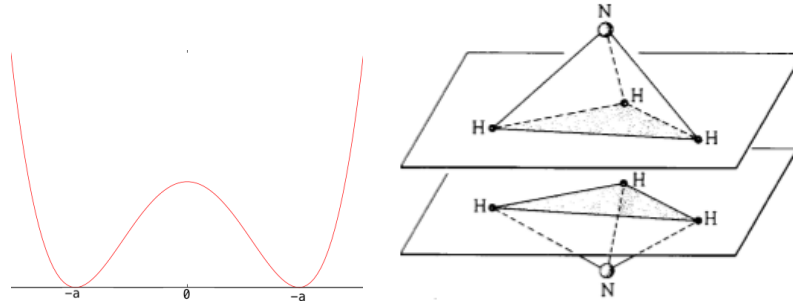


Figure 1.4: (Gauche) : Puits de potentiel double de l'atome d'azote N en fonction de sa distance par rapport au plan. (Droite) : Les deux positions d'équilibre de l'atome d'azote N, au sommet d'une pyramide de part et d'autre du plan des hydrogène.

trouve à l'équilibre. Or l'expérience a montré que la molécule passait d'un état à l'autre et donc que l'atome d'azote franchissait effectivement la barrière de potentiel, cela par effet tunnel.

Toujours dans le contexte quantique, et comme la fonction potentielle est paire, la fonction d'onde doit avoir une symétrie définie, paire (symétrique) ou impaire (antisymétrique). Alors on peut étudier ce comportement en construisant la fonction d'onde associée au système physique. D'après le principe de superposition, l'état d'un tel système peut être exprimé comme la combinaison linéaire de tous les états possibles du système (états propres).

$$\Psi_n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n,S}(x, t) + \Psi_{n,A}(x, t))$$

où  $\Psi_{n,S}(x, t)$  est la fonction d'onde symétrique du système tandis que  $\Psi_{n,A}(x, t)$  est la fonction d'onde antisymétrique du système, et les deux forment un système de fonction dit complet. C'est-à-dire que le système ne peut être que dans un des deux états ou dans une combinaison linéaire de ces deux états.

Microscopie à effet tunnel

Le microscope à effet tunnel, peut être schématisé par deux conducteurs, un est une surface horizontale à étudier tandis que le second est une pointe verticale (en or ou platine), dont l'extrémité est constituée par un atome (dans le cas idéal). Physiquement

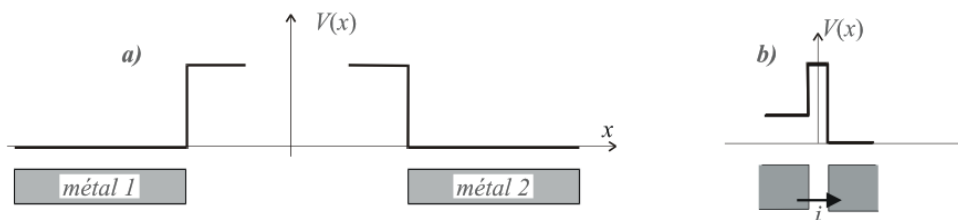


Figure 1.5: Microscopie à effet tunnel (STM pour Scanning tunneling microscope)

parlant, ces deux conducteurs peuvent être décrits par deux marches de potentiel qui se



raccordent. L'ensemble constitue une barrière de potentiel. On applique une différence de potentiel entre les deux conducteurs métalliques de façon à créer un courant électrique (figure 1.6-b). Le courant traverse la barrière par effet tunnel. Son intensité est très sensible à l'épaisseur,  $2a$ , de la barrière.

La pointe est solidaire de céramiques piézoélectriques qui peuvent lui faire subir des déplacements verticaux de très faible amplitude ainsi qu'un balayage horizontal dont l'amplitude peut être de l'ordre de quelques nanomètres à quelques micromètres. La

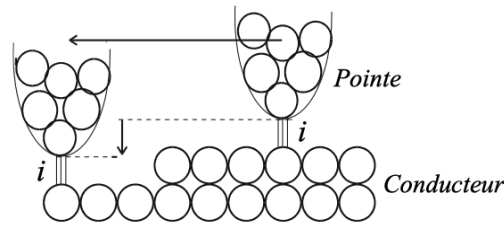


Figure 1.6

pointe est située à une distance de l'ordre de quelques angströms de la surface métallique que l'on souhaite étudier. Entre celle-là et la surface on applique une d.d.p de l'ordre de quelques millivolts à quelques volts. Il apparaît un très faible courant électrique (de l'ordre de ou inférieur au nanampère) dû à la circulation des électrons dans le métal en arrivent à son extrémité (sa surface). Tout se passe comme s'ils sortaient du matériau avant d'y revenir.

Pour faire court, le microscope à effet tunnel permet la construction d'objets atome par atome. C'est le microscope à effet tunnel qui, en 1990, permit à des chercheurs d'IBM avec 35 atomes de xénon sur une surface de nickel.



## 2. Annexe B

### 2.1 Principe d'incertitude de Heisenberg

Soit la fonction d'onde  $\psi(x, t)$  associée à une particule se trouvant au voisinage du point  $x_0$  à  $\Delta x_0$  près et de quantité de mouvement  $p_0$  à  $\Delta p_0$ . Soit  $\phi(p, t)$  la transformée de Fourier de  $\psi(x, t)$ .

On pose les changements de variables suivants :  $x = x_0 - \Delta x_0$  et  $p_x = p_{x_0} - \Delta p_{x_0}$ , alors,  $\langle x \rangle = \langle p_x \rangle = 0$ ,  $\rightarrow$

$$\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle} \text{ et } \Delta p_x = \sqrt{\langle (p_x - \langle p_x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle p_x^2 \rangle}$$

Ensuite, on considère l'intégrale suivante :

$$\forall \lambda \in \mathcal{R}, I = \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\psi + \lambda \frac{d}{dx} \psi \right|^2 dx \geq 0 \quad \text{[B1]}$$

or

$$\left| x\psi + \lambda \frac{d}{dx} \psi \right|^2 = \left( x\psi + \lambda \frac{d}{dx} \psi \right)^* \left( x\psi + \lambda \frac{d}{dx} \psi \right) \quad \text{[B2]}$$

$$= \left( x\psi^* + \lambda \left( \frac{d}{dx} \psi \right)^* \right) \left( x\psi + \lambda \frac{d}{dx} \psi \right) \quad \text{[B3]}$$

$$= x^2 |\psi|^2 + \lambda \left[ x \left( \psi^* \frac{d}{dx} \psi + \left( \frac{d}{dx} \psi \right)^* \psi \right) \right] + \lambda^2 \left| \frac{d}{dx} \psi \right|^2 \quad \text{[B4]}$$

de plus,

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi \implies \frac{d}{dx} |\psi|^2 = \left( \frac{d}{dx} \psi \right)^* \psi + \psi^* \left( \frac{d}{dx} \psi \right) \quad \text{[B5]}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi|^2 dx = \langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2 \quad \text{[B6]}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{d}{dx} |\psi|^2 dx = \left[ x |\psi|^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = -1 \quad \text{[B7]}$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dx} \psi \right|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{ip}{\hbar} \phi \right|^2 dp = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\phi|^2 dp \quad (\text{Égalité de Parseval - Plancherel}) \\ &= \frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad \text{[B8]}$$

Ceci nous permet d'écrire :

$$I = \left(\frac{\Delta p}{\hbar}\right)^2 \lambda^2 - \lambda + (\Delta x)^2 \quad (\text{B9})$$

Or

$$\begin{aligned} \forall \lambda \in \mathcal{R}, I \geq 0 &\implies 1 - 4(\Delta x)^2 \frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2} \leq 0 \\ &\implies \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \end{aligned} \quad (\text{B10})$$

# Références

- [1] Cours de "Mostafa Nassik" pour les étudiant(e)s de SMP4, (2015-2021)
- [2] Claude Cohen-Tannoudji, "Cohérences quantiques et dissipation," Cours de Claude Cohen-Tannoudji au Collège de France (1988-89-90), [http://www.lkb.ens.fr/users/laloe/public\\_html/PHYS/cours/college-de-france/](http://www.lkb.ens.fr/users/laloe/public_html/PHYS/cours/college-de-france/), 1988
- [3] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, "Mécanique quantique. Tome I," EDP Sciences/CNRS Éditions.(2018), 930/954
- [4] Stephen J. Gustafson Israel Michael Sigal, "Mathematical concepts of quantum mechanics," Springer. ISBN: 978-3-642-21866-8.
- [5] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, "Mécanique quantique. Tome II," EDP Sciences/CNRS Éditions. ISBN 13 "9782759822867"(2018), 704/698
- [6] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, "Mécanique quantique. Tome III," EDP Sciences/CNRS Éditions. ISBN 10 "275982151X"(2017), 792/794
- [7] Victor Mikhailovich Galitsky, Boris Mikhailovich Karnakov, Vladimir Il'yich Kogan, "La mécanique quantique : problèmes résolus. Tome 2," Publication : Les Ulis. Collection : Grenoble sciences
- [8] Habib Bouchriha, "Introduction à la physique quantique : Cours et applications," [2002]
- [9] Niels Walet, "Quantum Mechanics I," [2010]
- [10] [https://uel.unisciel.fr/chimie/strucmic/strucmic\\_ch01/co/strucmic\\_ch01.html](https://uel.unisciel.fr/chimie/strucmic/strucmic_ch01/co/strucmic_ch01.html)