

Filière Sciences de la Matière Physique « SMP »

Semestre 4

Cours de Mécanique Quantique 1

Contenu du cours de Mécanique Quantique 1

- Expériences Fondamentales
- Dualité Onde-Corpuscule
- Fonction d'Onde
- Équation de Schrödinger
- Applications aux potentiels à une dimension
- Oscillateur Harmonique
- Bases Mathématiques de la Mécanique Quantique
- Postulats
- Applications

Physique Classique & Physique Quantique

❖ Physique Classique

– Mécanique

- Newton $F = m g$
- Lagrange $L = T - V$; $r = x_1, x_2, \dots, x_i$;
 $V = (x^1, x^2, \dots, x^i)$
- Hamilton $H = T + V$

– Electromagnétisme (Maxwell,..)

– Optique

– Thermodynamique

– Physique Statistique

❖ Relativité $v \sim c$; $m = m_0 / \sqrt{1 - \gamma^2}$

❖ Physique Quantique

AUTEUR	Rayon Etage	TITRE	COTE
MOREL, Pierre	R2E4	Physique quantique et thermique: Cours de physique	530.145
BASDEVANT, Jean - Louis	R2E2	Mécanique quantique	530.145
JANOT, Christian	R2E3	Physique MP2/PC2: 2- Caractère quantique, matière et rayonnement.	530.145
GOL'DMAN		Problèmes de mécanique quantique	530.145(076)
AYANT, Yves	R2E2	Cours de mécanique quantique.	530.145
COHEN, Tannoudji	R2E2	Mécanique quantique tome 1.	530.145
BLOKHEINTSEV, D. L	R2E2	Mécanique quantique	530.145
ZEPP, G	R2E5	Mécanique quantique. Deuxième cycle universitaire et écoles d'ingénieurs. Exercices avec solutions.	530.145(076)
WICHMANN, Eyvind	R2E4	Physique quantique, Berkeley: Cours de physique, volume 4	530.145
CANET, Daniel	R2E5	Précis de mécanique quantique, cours, exercices et problèmes résolus. 2ème cycle	530.145(076)
BASDEVANT, Jean - Louis	R2E2	Mécanique quantique avec un CD-Rom de manuel Joffre	530.145
CHARLIER,	R2E2	La mécanique quantique et ses applications	530.145

Alphonse			
LAMBERT, Michel	R2E4	Introduction à la mécanique quantique	530.145
OMNES, Roland	R2E4	Comprendre la mécanique quantique	530.145
HLADIK, Jean	R2E5	Exercices corrigés de mécanique quantique	530.145(076)
FEYNMAN	R2E3	Le cours de physique de Feynman. Mécanique quantique	530.145
BASDEVANT, Jean - Louis	R2E5	Problèmes de mécanique quantique	530.145(076)
MARCHILDON, L	R2E3	Mécanique quantique	530.145
BIBOL, Michel	R2E2	Mécanique quantique: Une introduction philosophique	530.145
HLADIK, Jean	R2E5	Introduction à la mécanique quantique, cours et exercices corrigés. 1er cycle	530.145(076)
BELORIZKY, Elie	R2E2	Initiation à la mécanique quantique, approche élémentaire et applications	530.145
BARRIOL, J	R2E2	Eléments de mécanique quantique	530.145
BARRAT, Jean - Pierre	R2E2	Introduction à la physique quantique.	530.145
HLADIK, Jean	R2E5	Mécanique quantique: Atomes et molécules applications technologiques. Cours et exercices corrigés.	530.145(076)

A. Expériences Fondamentales

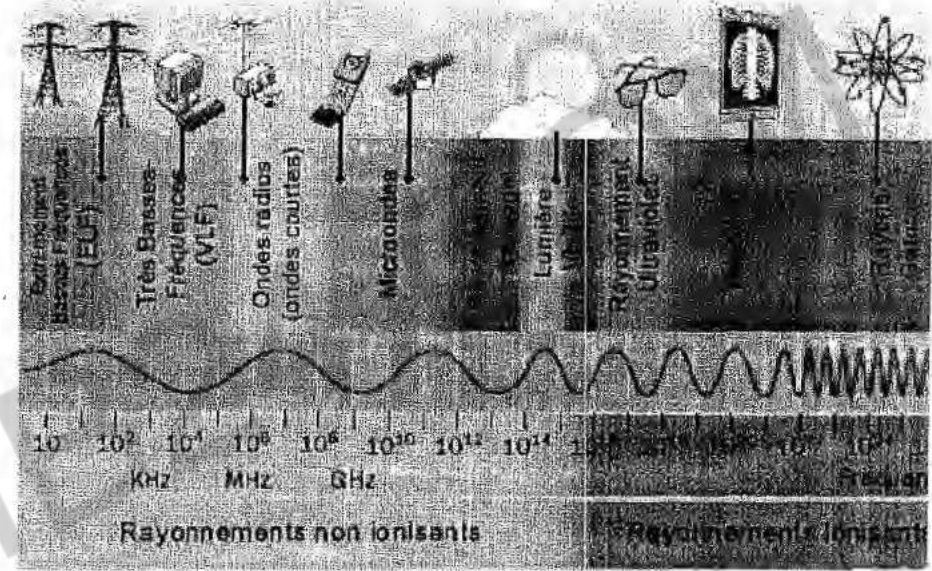
1. Rayonnement du corps noir & découverte des quanta

- L'histoire des quanta commence avec Max Planck [1900] en étudiant le problème du rayonnement du corps noir.

Pour assurer des conditions d'équilibre thermodynamique, il faut considérer un système parfaitement isolé, comme par exemple un four parfaitement clos et thermiquement isolé : c'est le corps noir.

Observations expérimentales :

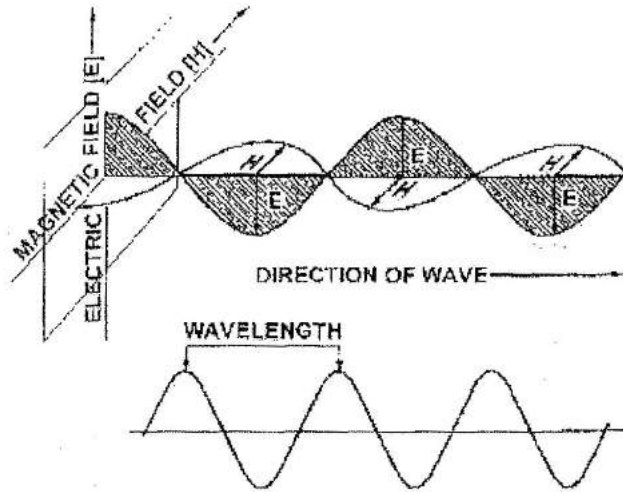
- La longueur d'onde de la lumière émise varie avec sa température.
- Basses températures : lumière rouge,
- Accroissement de la température: orange, puis au jaune, au blanc
- Hautes températures : bleu.
- Le rayonnement du corps noir balaye la totalité du spectre de fréquences de la lumière visible.



1.a. Présentation classique de la densité d'énergie dans la cavité

Modèle de Rayleigh et Jeans

- Étude dans le cadre de la physique classique pour décrire la loi du rayonnement du corps noir à partir de la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell.
- Hypothèse de base : les échanges d'énergie entre les parois du corps noir s'effectuent de manière continue, c'est-à-dire par quantités et sur des durées aussi petites que possible sans être nulles.



Tige linéaire de côté a

- Onde se propageant suivant $x'Ox$
- $E(x,t) = E_0 \sin(2\pi x/\lambda) \sin(2\pi \nu t)$
- Le rayonnement en équilibre établit un système d'ondes stationnaires
- Le champ électrique E, doit s'annuler sur les parois ($x = 0$ et $x = a$)
 $n \lambda/2 = a$
 $\nu = c n/2a$
- n entier naturel
- Densité de fréquence à une dimension = $N(\nu) d\nu$.
- Le pas de fréquence = $c/2a$,

- Donc dans un intervalle de largeur $d\nu$ on aura
 $N(\nu)d\nu = 2a/c d\nu$ fréquences!

Résultats de Rayleigh-Jeans

- Boite métallique
- Pour une cavité assimilée à une boîte de volume $V = a^3$:
- $N(\nu) d\nu = (8\pi a^3/c^3) \nu^2 d\nu$.
- D'après la Statistique de Boltzmann :
à chaque onde ou « oscillateur » est associée une énergie égale à $k_B T$,

D'où la densité d'énergie dans la boîte (énergie par unité de volume, c'est-à-dire en divisant par a^3)

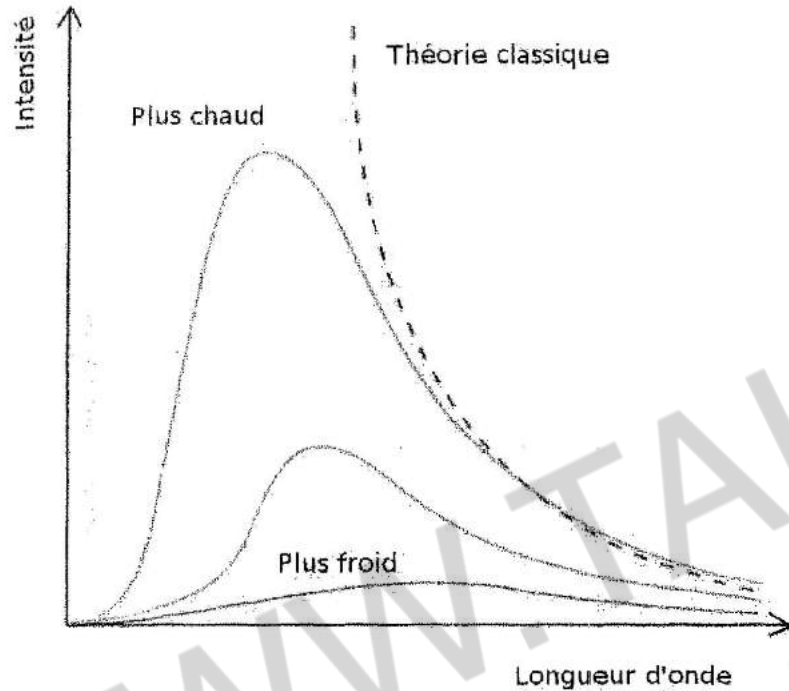
$$\rho(\nu, T) d\nu = 8\pi /c^3 \nu^2 k_B T d\nu \text{ ou}$$

$$\rho(\nu, T) = D(n) \langle E \rangle$$

Formule de Rayleigh – Jeans

$$D(\nu) = 8\pi \nu^2 /c^3 \text{ et } \langle E \rangle = k_B T$$

- Les résultats de Rayleigh et Jeans sont contradictoires avec les observations expérimentales :
 - A basse fréquence l'accord avec la théorie est correct,
 - A haute fréquence, le désaccord est total :
c'est « la catastrophe de l'ultra-violet » !!



Conclusion : La théorie de l'électromagnétisme de Maxwell est incapable de résoudre le problème du rayonnement du corps noir.

1.b Modifications proposées par Planck

- **Nouvelle hypothèse de Planck** : les échanges d'énergie, au lieu d'être continus, se font par quantités finies.
- Pour une fréquence donnée ν : $\epsilon_\nu = h\nu$
 h : constante de Planck ~ action ML^2T^{-1} .
 $h = 6,6262 \cdot 10^{-34}$ Joule.seconde
- Ces quantités finies d'énergie s'appellent des *quanta* (quantum au singulier = quantité en latin!!).

La quantité d'énergie échangée est donc un multiple entier du quantum $\epsilon_\nu = h\nu = \hbar\omega$: c'est à dire $E_\nu = n h\nu$ ($n \in \mathbb{N}$)

1.c Modélisation du rayonnement du corps noir à l'aide de l'hypothèse de Planck ; Naissance de la théorie des quanta

- Il suffit de calculer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$.
- En thermodynamique, lorsqu'un système en contact avec un thermostat (grand réservoir thermique à la température T) est susceptible d'avoir une énergie variable :
- la probabilité de le trouver avec une énergie E donnée est

$$p_n = C \exp(-\beta n \epsilon_\nu)$$

qui correspond à distribution de Boltzmann, avec :

$$\sum p_n = 1 \text{ et } \beta = 1/k_B T$$

- Dans l'hypothèse de Planck, les seules valeurs possibles pour l'énergie d'un oscillateur sont $E_n = n \epsilon_\nu$ et l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ d'un oscillateur est donnée par

$$\langle E \rangle = \sum n \epsilon_\nu p_n = \sum n \epsilon_\nu \exp(-\beta n \epsilon_\nu) / \sum \exp(-\beta n \epsilon_\nu)$$

soit

$$\langle E \rangle = h\nu / [\exp(\beta h\nu) - 1]$$

- Densité d'énergie
 $\rho(n, T) = D(n) \langle E \rangle = 8\pi h\nu^3 / c^3 [\exp(\beta h\nu) - 1]^{-1}$

dont l'allure est bien conforme avec les résultats expérimentaux : Loi de Planck

1. d Conséquences

- **Loi de Wien** (Prix Nobel 1911) : Existence à chaque température d'un maximum pour le pouvoir émissif à une longueur d'onde donnée

$$\lambda_M T = 2897 \text{ } \mu\text{m}\cdot\text{Kelvin}$$

Cette loi permet une bonne estimation de la température des astres ou objets :

- **Etoile polaire** $\lambda_M = 3500 \text{ } \text{Å}$, $T = 8300 \text{ K}$
- **Etoile type O** : $\lambda_M = 60 \text{ nm}$, $T = 50\,000 \text{ K}$ (ultraviolet)
- **Soleil** $\lambda_M = 5100 \text{ Å}$, $T = 5700 \text{ K}$ (visible)
- **Terre** $\lambda_M = 11 \text{ mm}$, $T = 255 \text{ K}$ (Infra-rouge thermique)
- **Lampe à filament de Tungstène** $\lambda_M = 966 \text{ nm}$, $T = 3\,000 \text{ K}$

- **Loi de Stefan** (1835- 1893) : Elle exprime l'énergie totale rayonnée par une surface unité portée à une température T :

$$W_T = \sigma T^d ; \quad \sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{K}^{-4} / \text{m}^2$$

- **Soleil** : $W_T \sim 6000 \text{ W/cm}^2$
- **Etoile polaire** : $W_T \sim 27000 \text{ W/cm}^2$

Exemples d'applications

a. Détermination de l'albédo terrestre

L'albédo est la proportion d'énergie lumineuse solaire qui n'est pas absorbée par la Terre, elle est réfléchiée par l'atmosphère.

Données et mesures possibles depuis la Terre :

- R_T : rayon de la Terre
- R_S : rayon du Soleil
- d : distance Terre-Soleil
- θ : diamètre apparent du Soleil = $2R_S/d = 32' = 9,308 \times 10^{-3} \text{ rd}$
- T_T : Température moyenne de l'atmosphère terrestre = $-18 \text{ }^\circ\text{C} = 255 \text{ K}$ (Vive l'effet de serre !!!)
- T_S : Température de surface du Soleil
- λ_{max} du Soleil = $0,5014 \text{ } \mu\text{m}$

$$T_S = 2,898 \times 10^{-6} / \lambda_{\text{max}} = 5780 \text{ K} \quad (\text{ Application de la loi de Wien })$$

$$\text{Puissance émise par le soleil } P_0 = 4\pi R_S^2 \sigma T_S^4 \quad (\text{ Application de la loi de Stefan })$$

$$\text{Puissance reçue par la Terre } P_S = P_0 \pi R_T^2 / 4\pi d^2 = P_0 R_T^2 / 4d^2 = 4\pi R_S^2 \sigma T_S^4 R_T^2 / 4d^2 = \pi \theta^2 \sigma T_S^4 R_T^2 / 4$$

$$\text{Puissance émise par la Terre } P_T = 4\pi R_T^2 \sigma T_T^4 \quad (\text{ Application de la loi de Stefan })$$

$$P_T / P_S = 4\pi R_T^2 \sigma T_T^4 / (\pi \theta^2 \sigma T_S^4 R_T^2 / 4) = 16 / \theta^2 (T_T / T_S)^4 = 0,689$$

$$\text{Albédo } a = 1 - P_T / P_S = 0,311 \quad (\text{ Environ } 30 \% \text{ de l'énergie reçue est réfléchiée par l'atmosphère })$$

b. Détermination de la perte de masse du Soleil

Données :

$$R_S: \text{ rayon du Soleil } = 696265 \text{ km}$$

$$T_S : \text{ Température de surface du Soleil } = 5780 \text{ K}$$

$$\text{Puissance émise par le soleil } P_S = 4\pi R_S^2 \sigma T_S^4 = 3,85 \times 10^{26} \text{ W}$$

$$\text{Masse perdue par seconde (relation d'Einstein) } = P_S / c^2 =$$

$$4,291 \times 10^9 \text{ kg/s (plus de 4 millions de tonnes par seconde !!)}$$

D'autre part, le Soleil perd aussi environ 1 million de tonnes de matière par seconde par l'intermédiaire du vent solaire.

Masse perdue par le Soleil depuis sa formation ($4,6 \cdot 10^9$ années) :
 $M = 5,3 \times 10^9 \times 4,6 \times 10^9 \times 365,25 \times 24 \times 3600 = 7,7 \times 10^{26}$ kg (environ 128 masses terrestres, ce qui est très peu (0,038%) par rapport à la masse du Soleil égale à 333432 masses terrestres.

Rayonnement infrarouge du corps humain

Autre application à la température terrestre ambiante : rayonnement thermique infrarouge.

Notre corps, à $37^\circ\text{C} \approx 310\text{K}$, émet, comme un corps noir, un rayonnement de longueur d'onde environ $10 \mu\text{m}$ (infrarouge moyen).

Ce rayonnement n'est pas mesurable le jour car notre corps et les objets environnants reçoivent la lumière solaire :

Mais, pendant la nuit, ce rayonnement est mesurable et est à la base des **caméras infrarouge de vision nocturne**, (armée, police, reportages...)

De manière générale, l'ensemble des objets vivants ou non rayonnent comme un corps noir : c'est parce que notre corps, à 37°C , est en général plus chaud que les objets ou végétaux environnants (à température ambiante) qu'un contraste s'établit, permettant de voir une personne la nuit.

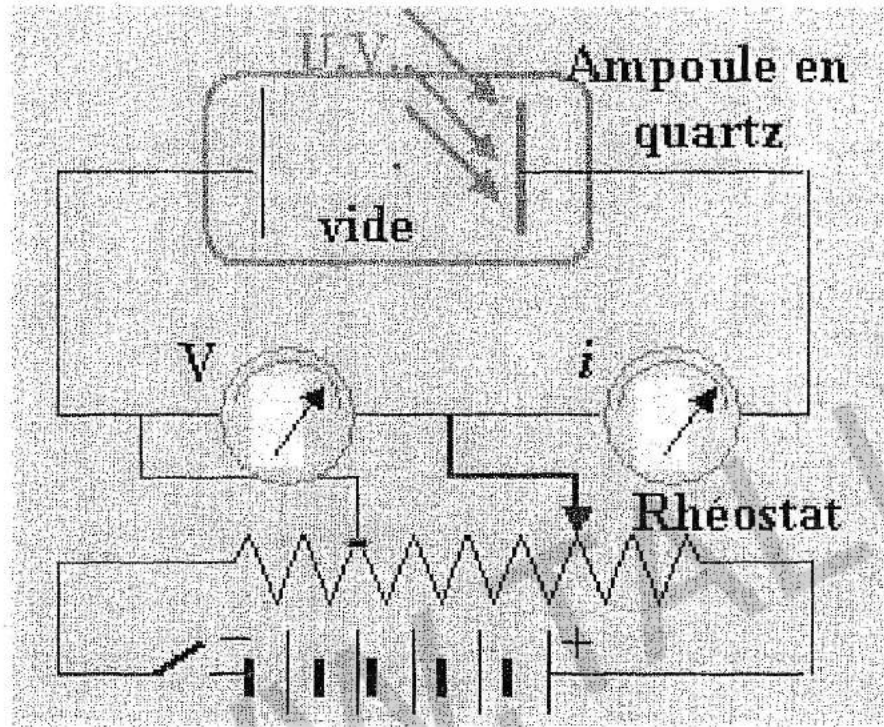
2. L'effet photoélectrique

- Découvert par hasard par Heinrich Hertz et étudié systématiquement par Lenard.
- Une plaque de métal éclairée par un faisceau lumineux de fréquence ν émet dans certaines conditions des électrons :

2. a. Caractéristiques observées

- i) Au-dessous d'une certaine fréquence seuil ν_0 du rayonnement, aucun électron n'est émis,
- ii) Si $\nu \geq \nu_0$, l'émission est quasi instantanée, même à faible intensité lumineuse.
- iii) Si $\nu \geq \nu_0$, la variation d'intensité lumineuse n'introduit pas de variation de la vitesse des électrons émis (photoélectrons), mais leur nombre.
- iv) Si $\nu \geq \nu_0$, la vitesse maximale des photoélectrons augmente quand la fréquence lumineuse augmente : $v_{\text{max}} \sim \nu$

2. b. Exemple de montage permettant d'observer l'effet photoélectrique



Réf. : http://www.walter-fendt.de/ph14f/photoeffect_f.htm

2. c. Échec de la théorie électromagnétique

La validité de la théorie classique d'une structure continue de la lumière est mise en doute. Elle stipule que :

- 1. L'énergie transportée par l'onde étant proportionnelle à son intensité, l'émission d'électrons devrait être observée

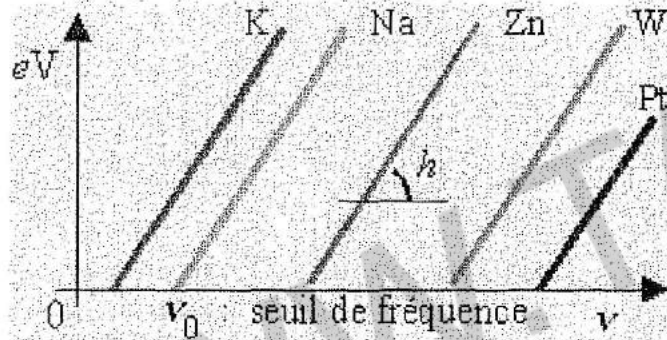
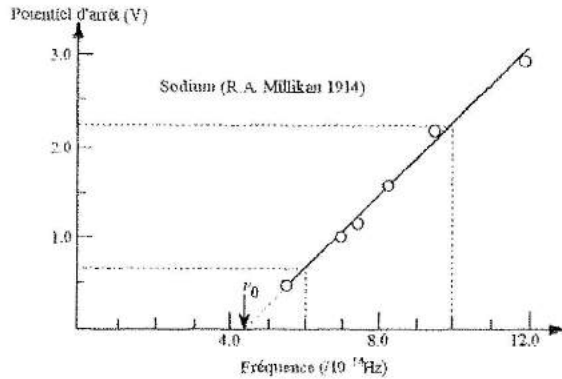
pour toute gamme de fréquences pourvu que l'intensité soit suffisante :

- contradiction avec l'observation de l'existence d'un seuil photoélectrique.
- 2. Si l'intensité du rayon lumineux est faible, il suffirait d'attendre le temps nécessaire pour que ce peu d'énergie transmise à un électron s'accumule, et atteigne une valeur suffisante pour qu'il soit extrait du métal :
 - contradiction avec l'observation d'un effet quasi instantané.
- 3. L'énergie absorbée étant croissante, les électrons recevant une plus grande quantité d'énergie devraient être émis avec une vitesse également croissante :
 - contradiction avec l'invariance de la vitesse maximum par rapport à l'intensité.
- 4. L'énergie de l'onde lumineuse ne dépend pas de sa fréquence d'onde :
 - contradiction avec la variation de la vitesse maximum avec n .

Cette théorie classique devrait donc être corrigée !

2. d. Théorie corpusculaire de la lumière d'Einstein

Hypothèse d'Einstein (1905) : la lumière n'est pas une onde électromagnétique continue, mais un phénomène corpusculaire.



Métal	Cs	Rb	K	Na	Ca	Zn	Fe	Ni
$E_c(eV)$	2.1	2.2	2.4	2.5	2.3	3.4	4.8	5.0

3. L'effet Compton

Diffusion Compton : c'est la diffusion d'un photon sur une particule de matière, comme un électron.

Effet Compton : c'est l'augmentation de la longueur d'onde du photon par la diffusion.

Phénomène observé la première fois par Compton en 1923.

L'expérience de Compton montre que la lumière peut se comporter comme un faisceau de particules dont l'énergie est proportionnelle à la fréquence (ou inversement à la longueur d'onde).

Importance de cet effet : la lumière ne peut pas être purement décrite comme seulement une onde, mais aussi comme une particule

Interprétation :

Considérons un photon venant de la gauche et se dirigeant vers la droite avec une impulsion \vec{p}_1 et une énergie $E = p_1 c$. Le photon est diffusé par un électron au repos d'énergie initiale $m_e c^2$. Le photon est diffusé dans une direction faisant un angle θ par rapport à la direction d'origine. L'électron prenant une direction ϕ , l'impulsion du photon après diffusion sera \vec{p}_2 et celle de l'électron \vec{p}_e .

Pour connaître la variation de longueur d'onde du photon dû à la collision, on utilise la conservation de la quantité de mouvement et la conservation de l'énergie. La première s'écrit, selon les directions «x» et «y», respectivement le long de la trajectoire incidente du photon, et sa perpendiculaire (voir la figure):

$$\begin{cases} p_1 = p_2 \cos \theta + p_e \cos \phi \\ 0 = p_2 \sin \theta - p_e \sin \phi \end{cases}$$

En isolant le terme contenant p_e dans les deux équations, en élevant ensuite au carré, puis en additionnant les deux

équations, et finalement en utilisant l'identité trigonométrique: $\cos^2\varphi + \sin^2\varphi = 1$, on obtient:

$$p_e^2 = p_1^2 + p_2^2 - 2p_1 p_2 \cos\theta$$

D'un autre côté, la conservation de l'énergie s'écrit:

$$\underbrace{p_1 c}_{\gamma} + \underbrace{m_e c^2}_{e^-} = \underbrace{p_2 c}_{\gamma} + \underbrace{\sqrt{p_e^2 c^2 + m_e^2 c^4}}_{e^-}$$

où m_e et c sont respectivement la masse de l'électron et la vitesse de la lumière. Le signe γ est utilisé ici comme habituellement pour désigner le photon-lui-même. De nouveau en isolant le terme en p_e^2 , on obtient:

$$p_e^2 = (p_1 - p_2)^2 + 2m_e c (p_1 - p_2)$$

En soustrayant les deux expressions obtenues pour p_e^2 , on peut calculer l'expression :

$$2p_1 p_2 (1 - \cos\theta) = 2m_e c (p_1 - p_2).$$

On introduit alors l'hypothèse quantique selon laquelle l'impulsion d'un photon est reliée à sa longueur d'onde λ comme: $p = h/\lambda$ où h est la constante de Planck. Ainsi, l'équation précédente donne directement la variation de longueur d'onde du photon:

$$\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1 = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\theta)$$

De la même manière, en utilisant l'identité trigonométrique

$$1 - \cos\theta = 2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

on peut écrire:

$$\Delta\lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_e c} \sin^2\frac{\theta}{2}$$

Cette expression est identique à celle qui s'obtient par un calcul utilisant la mécanique quantique et les diagrammes de Feynman.

$\frac{h}{m_e c}$

Le facteur : $\frac{h}{m_e c}$ porte le nom de "longueur d'onde de Compton" de l'électron. On le note λ_C , il vaut 0,024 Å.

Variation de l'énergie du photon diffusé

La variation de longueur d'onde va de paire avec une variation d'énergie : ΔE donnée par le Postulat de Planck-Einstein :

$$\Delta E = h\Delta\nu = hc\left(\frac{1}{\lambda + \Delta\lambda} - \frac{1}{\lambda}\right) = -hc\frac{\Delta\lambda}{\lambda(\lambda + \Delta\lambda)}.$$

Ainsi, si un photon incident possède une énergie : E_0 , alors l'énergie de ce photon après diffusion sur un électron de la matière aura l'énergie :

$$E = \frac{E_0}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)}$$

Où

$$\alpha = \frac{E_0}{m_e c^2}$$

$$\text{et } m_e c^2 = 0.511 \text{ MeV.}$$

L'énergie perdue par le photon est entièrement distribuée à l'électron sur lequel la diffusion s'est faite, l'électron acquiert ainsi l'énergie cinétique:

$$T_e = E_0 - E = E_0 - \frac{E_0}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)}$$

Nous obtenons ainsi la relation suivante:

$$T_e = E_0 \frac{\alpha(1 - \cos \theta)}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)}$$

4. Dualité onde-particule

En 1905, Albert Einstein réconcilia la théorie de Huygens avec celle de Newton : il expliqua l'effet photoélectrique, un effet dans lequel la lumière n'agit pas en tant qu'onde, en postulant l'existence

des photons, quanta d'énergie lumineuse avec des qualités de particules. Einstein postula que la fréquence ν de cette lumière, est liée à l'énergie E des photons :

$$E = h\nu$$

où h est la constante de Planck ($6,626 \times 10^{-34} \text{ J s}$).

En 1924, Louis de Broglie affirma que toute matière (et pas seulement la lumière) a une nature ondulatoire. Il associa la quantité de mouvement p d'une particule à une longueur d'onde λ , appelée

« longueur d'onde de de Broglie » :

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

C'est une généralisation de la relation de Planck-Einstein

indiquée ci-dessus, car la quantité de mouvement (ou l'impulsion) d'un photon est donnée par

$$p = \frac{E}{c}$$

où c est la vitesse de la lumière dans le vide, et $\lambda = \frac{c}{\nu}$ (si on remplace p et ν dans l'équation de de Broglie, on retrouve l'équation d'Einstein).

Le postulat de de Broglie a des implications importantes, à la fois conceptuelles et pratiques. L'électron ayant un aspect ondulatoire, il est nécessairement délocalisé sur une région de l'espace ; ainsi, *il faut abandonner la notion de position exacte ou de trajectoire*

décrite par un électron. En outre, pour pouvoir calculer des interférences entre électrons, il faudra introduire une fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ pour décrire l'électron.

Cette fonction d'onde contient toutes les informations sur le système. La probabilité de présence du système \vec{r} à l'instant t est :

$$d\mathcal{P}(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 \vec{r} \quad \text{avec} \quad \int d\mathcal{P} = 1$$

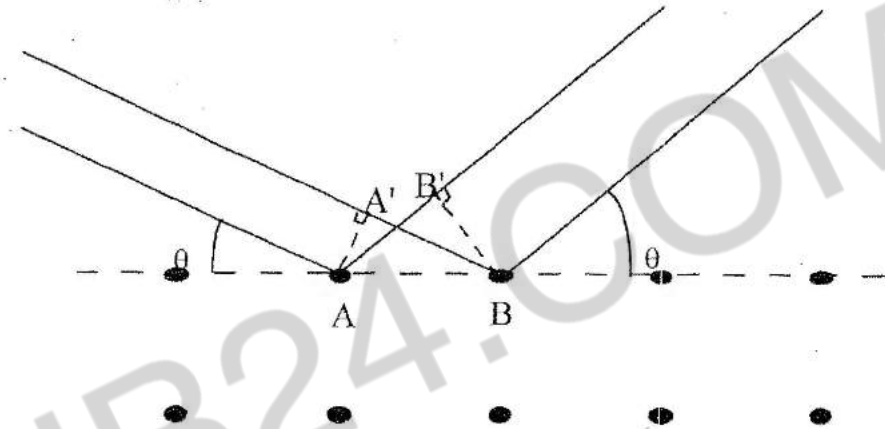
et $\psi(\vec{r}, t)$ est solution de l'équation de Schrödinger

5.1. Expériences mettant en évidence la nature ondulatoire des particules

Diffraction des rayons X. Théorie de Bragg

Lorsqu'un faisceau de rayons X monochromatiques parallèles est envoyé sur un cristal, supposé monoatomique et de maille élémentaire cubique : chaque atome du cristal diffuse la lumière incidente dans toutes les directions. Comme dans le cas d'un réseau optique, les ondes diffusées par chaque atome vont interférer les unes avec les autres avec des phases dépendant de leur position. Il existe des directions privilégiées sur lesquelles ces ondes interfèrent de manière constructive, et donc pour lesquelles l'intensité diffractée est importante. Le calcul de ces directions consiste en l'évaluation des différences de chemin optique entre les ondes diffusées par deux atomes voisins, appartenant tout d'abord à un même plan cristallin, puis à deux plans voisins.

- Cas d'un plan réticulaire :



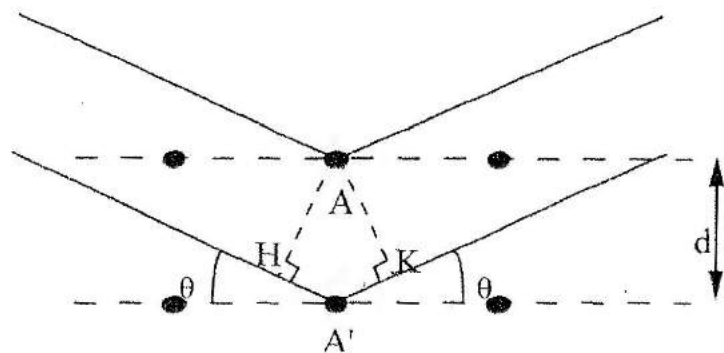
La différence de marche est: $A'B - AB'$. Les interférences sont constructives si cette différence vaut un nombre entier de fois la longueur d'onde, soit :

$$|A'B - AB'| = AB |\cos \theta' - \cos \theta| = n \lambda$$

Le maximum d'intensité principal (99 % de la lumière en pratique) correspond à $n = 0$ soit :

$$\theta' = \theta$$

- Cas de deux plans voisins, séparés de d :



La différence de marche est $HA' + A'K = n\lambda$, d'où la condition :

$$2d \sin \theta = n\lambda \quad (\text{Condition de Bragg}).$$

Pour obtenir un signal important, il faudra donc placer l'échantillon suivant un angle θ , donné pour le premier ordre de diffraction par :

$$\sin \theta = \lambda/2d$$

Ceci n'est possible que si $\lambda < 2d$, ce qui confirme la nécessité d'utiliser des rayons X. A λ fixé, la mesure de cet angle θ donne immédiatement la distance entre les plans du réseau. Cette expérience peut être recommencée en tournant l'échantillon, par exemple de 90° , afin de déterminer la distance entre les plans qui apparaissent verticaux sur la figure précédente. Ainsi, il est possible de déterminer toute la structure du cristal.

Expérience de Davisson et Germer: Diffraction d'électrons

L'expérience de Davisson et Germer (1927) est essentiellement la même que celle de Bragg et von Laue qui vient d'être décrite, à une différence (de taille !) près : le faisceau de rayons X incidents est remplacé par un faisceau d'électrons monocinétiques. Les résultats expérimentaux montrent que les électrons sont diffusés dans certaines conditions correspondant à des angles θ_n tels que :

$$2d \sin \theta_n = n\lambda_e$$

comme dans le cas de la diffraction d'un faisceau de rayons X, en associant aux électrons une longueur d'onde λ_e . Ces expériences de diffraction par un cristal montrent que *les électrons (corpuscules) se comportent donc exactement comme des ondes, dont la longueur d'onde est de l'ordre de l'Angstrom.*

5.2 Modèle de Bohr

Le **modèle de Bohr** est une théorie physique, basée sur le modèle planétaire de Rutherford, cherchant à comprendre la constitution d'un atome, et plus particulièrement, celui de l'hydrogène et des ions hydrogénoïdes (ions ne possédant qu'un seul électron sur la couche périphérique).

Ce modèle est un complément du modèle planétaire d'Ernest Rutherford qui décrit l'atome d'hydrogène comme un noyau massif et chargé positivement, autour duquel se déplace un électron chargé négativement.

Le problème posé par ce modèle est que l'électron, charge électrique accélérée, devrait selon la physique classique, rayonner de l'énergie et donc finir par s'écraser sur le noyau.

Niels Bohr propose d'ajouter deux contraintes :

1. L'électron ne rayonne aucune énergie lorsqu'il se trouve sur une orbite stable (ou orbite stationnaire). Ces orbites stables sont différenciées, quantifiées. Ce sont les seules orbites sur lesquelles l'électron peut tourner.
2. L'électron ne rayonne ou n'absorbe de l'énergie que lors d'un changement d'orbite.

Pour commodité de lecture, les orbites possibles de l'électron sont représentées dans la littérature comme des cercles de diamètres *quantifiés*. Dans le modèle quantique, il n'existe en fait pas de position ni de vitesse précise d'un électron, et il ne peut donc parcourir un « cercle » ; son orbitale peut en revanche être parfois sphérique.

Théorie

L'atome d'hydrogène est modélisé par un électron de masse m tournant autour du proton.

L'énergie mécanique

L'interaction entre ces deux particules est électrostatique: la force intervenant est la force de Coulomb. Ceci nous permet donc d'écrire l'énergie potentielle de l'électron à une distance r du noyau :

$$E_p = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r} = -\frac{e^2}{r}$$

- ϵ_0 est la permittivité du vide

- q_e est la charge de l'électron

- $e^2 := \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$, par souci de simplification d'écriture. D'autre

part, comme il est question d'un mouvement à force centrale, l'accélération de cet électron vaut $\vec{a} = -v^2/r \cdot \vec{u}_r$ où v est la vitesse de l'électron, et \vec{u}_r est le vecteur unitaire centrifuge.

Le principe fondamental de la dynamique implique alors :

$$-m \frac{v^2}{r} = -\frac{e^2}{r^2}$$

On peut alors calculer l'énergie cinétique :

$$E_c = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{e^2}{2r}$$

Finalement, on obtient l'énergie mécanique :

$$E = E_c + E_p = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r}$$

Quantification

Ici intervient alors la *quantification* du moment cinétique \vec{L} : selon l'hypothèse de Bohr :

$L = n\hbar$ où n est un entier positif non nul, et \hbar est la constante de Planck "réduite" (d'un facteur 2π).

: seules les orbites ayant ce moment cinétique ne rayonnent pas : les orbites sont donc "quantifiées" par le nombre entier n positif. Cette relation s'écrit :

$$mrv = n\hbar$$

Cette quantification a été confirmée par l'expérience de Franck et Hertz. L'intérêt de cette expérience est de montrer que la quantification n'est pas seulement due à la quantification de la lumière, mais bien à la quantification de l'orbite des électrons présents dans l'atome.

Résultats

Les deux équations précédentes :

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2} \text{ et } mvr = n\hbar$$

permettent de calculer la distance entre le noyau et l'électron, r (ainsi que la vitesse v) :

$$\frac{mv^2}{r_n} = \frac{e^2}{r_n^2} \Rightarrow mv^2 r_n = e^2 \Rightarrow (mvr_n)^2 = e^2 m r_n \Rightarrow (n\hbar)^2 = e^2 m r_n$$

$$r_n = a_0 n^2$$

où $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$ est le rayon de Bohr, soit environ $a_0 = 0,529$

$\text{Å} = 52,9 \text{ pm}$.

L'énergie totale de l'électron est aussi quantifiée :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r_n} = -\frac{me^4}{2n^2\hbar^2} = \frac{E_1}{n^2}$$

$$E_n = \frac{E_1}{n^2}$$

avec

$$E_1 = -\frac{me^4}{2\hbar^2}$$

E_1 est une unité d'énergie, appelée énergie de Rydberg (cf constante de Rydberg), et vaut environ -13.6 eV.

Néanmoins cette théorie, même modifiée par Sommerfeld pour tenir compte des orbites elliptiques, ne survivra pas à la révolution de la mécanique quantique en 1926.

WWW.TALIB24.COM

Equation de Schrödinger

1. Introduction

Une avancée essentielle en physique quantique a été faite lorsque avec Schrödinger [1] écrivit en 1926 l'équation d'onde qui porte son nom. Elle n'a pas été écrite dans un trait d'intuition génial, mais au terme d'une réflexion, qui cherchait à inclure les idées nouvelles qui s'étaient récemment dégagées en physique, en particulier la quantification de certaines grandeurs et la dualité onde-corpuscule, mise en avant par de Broglie. Cette équation joue un rôle aussi essentiel que l'équation fondamentale de la dynamique. L'équation de Newton permet de prédire ou d'expliquer le mouvement macroscopique d'une particule, si l'on connaît les forces auxquelles elle est soumise et les conditions initiales ; l'équation de Schrödinger permet d'analyser au niveau quantique le comportement d'une particule placée dans un potentiel donné.

On ne va pas faire ici une démonstration de l'établissement de l'équation de Schrödinger. On se contentera de justifier cette équation dans le cas d'un problème à une dimension x . L'équation différentielle régissant la fonction d'onde $\psi(x, t)$ associée à la particule fait intervenir des dérivées partielles de ψ , $\partial\psi/\partial t$, $\partial\psi/\partial x$, $\partial^2\psi/\partial x^2$, $\partial^2\psi/\partial t^2$, ..., sans que l'on sache a priori lesquelles.

[1] Schrödinger, physicien allemand, 1858 - 1947.

La situation se complique davantage vu que la longueur d'onde associée à l'onde $\lambda = h/p$ ne demeure pas constante si le potentiel varie.

2. Arguments conduisant à l'équation de Schrödinger

On va utiliser un certain nombre de relations et de conditions qui doivent être satisfaites, pour trouver une équation différentielle qui vérifie ces conditions. Il ne s'agit pas d'une démonstration. On procède simplement par des conditions nécessaires.

On prend donc un problème à une dimension x , d'une particule de masse m , non relativiste, placée dans un potentiel $V(x, t)$. La longueur d'onde de de Broglie de la particule est notée λ , l'énergie de la particule E , la fréquence ν de l'onde associée à cette particule, telles que $\lambda = h/p$, $E = h\nu$ que l'on peut écrire également

$$E = p^2/2m + V \quad (1)$$

La forme de l'équation différentielle est supposée linéaire, si ψ_1 et ψ_2 sont solutions, $\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2$ est aussi solution.

L'équation différentielle sera de puissance 1 par rapport à la fonction ψ et ses dérivées partielles.

On introduit le vecteur d'onde k de module $2\pi/\lambda$ et $\omega = 2\pi\nu$. La relation (1) s'écrit :

$$\hbar^2 k^2/2m + V = \hbar \omega \quad (1')$$

Une fonction trigonométrique s'écrit $\sin(kx - \omega t)$, $\cos(kx - \omega t)$. La relation (1') incite à examiner une équation différentielle contenant $\partial^2 \psi / \partial x^2$ qui fait apparaître k^2 , $\partial \psi / \partial t$ qui fait apparaître ω et ψ qui intervient en multiplicateur de V .

On choisit une fonction $\cos(kx - \omega t) + \gamma \sin(kx - \omega t)$ que l'on va obliger à satisfaire à l'équation :

$$\alpha \partial^2 \psi / \partial x^2 + V \psi = \beta \partial \psi / \partial t \text{ et à l'équation (1')}$$

$$V \psi = V \cos(kx - \omega t) + \gamma V \sin(kx - \omega t)$$

$$-\beta \partial \psi / \partial t = -\omega \beta \sin(kx - \omega t) + \gamma \omega \beta \cos(kx - \omega t)$$

$$\alpha \partial^2 \psi / \partial x^2 = -k^2 \alpha \cos(kx - \omega t) - \gamma k^2 \alpha \sin(kx - \omega t)$$

On identifie en $\cos(kx - \omega t)$ et en $\sin(kx - \omega t)$

$$-k^2 \alpha - \gamma \omega \beta + V = 0$$

$$-k^2 \alpha \gamma + \omega \beta + \gamma V = 0$$

Ce qui donne $\gamma = \pm i$ et l'on prend conventionnellement $\gamma = -i$.

En rapprochant les deux équations suivantes

$$-\hbar^2 k^2 / 2m + V = \omega \hbar$$

$$-k^2 \alpha + \gamma V = -\omega \beta / \gamma$$

il vient $\alpha = -\hbar^2 / 2m$; $\beta = i \hbar$

D'où la forme d'une équation différentielle qui satisfait aux conditions que l'on a précisées initialement

$$-\hbar^2 / 2m \partial^2 \psi / \partial x^2 + V \psi = i \hbar \partial \psi / \partial t$$

Equation de Schrödinger

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

que l'on peut généraliser à trois dimensions

$$i \hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r}, t)}{\partial z^2} \right) = V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

L'équation différentielle considérée ne s'applique évidemment pas aux particules relativistes. Il faudrait dans ce cas, remplacer $E = p^2 / 2m + V$ par $E = (p^2 c^2 + m_0 c^2)^{1/2} + V$

Un développement fort ingénieux de la *mécanique quantique relativiste* a été fait par Dirac²[2].

3. Equation de Schrödinger indépendante du temps

L'un des problèmes fréquents à résoudre en mécanique est la recherche des états dans lesquels un système a une énergie bien déterminée. Pour des raisons de simplification, on va considérer une masse m se déplaçant dans un espace à une seule dimension, x .

²[2] Paul Dirac, physicien britannique, 1902 - 1984.

$$E_C + E_P = E$$

soit en terme d'opérateurs

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

Dans le cas où l'énergie potentielle ne dépend pas explicitement du temps, on cherche une solution de la forme

$$\psi(x, t) = \varphi(x) \chi(t)$$

$$-\hbar^2/2m d^2 \varphi / dx^2 \chi(t) + V(x) \varphi(x) \chi(t) = i \hbar \varphi(x) d\chi(t) / dt$$

$$-\hbar^2/2m (1/\varphi) d^2 \varphi / dx^2 + V(x) = i \hbar (1/\chi) d\chi(t) / dt$$

Les deux membres de cette équation, qui dépendent l'un de la variable x , l'autre de la variable t , ne peuvent être égaux que s'ils sont égaux à une constante K .

L'intégration de l'équation dépendant du temps s'écrit :

$$\chi'(t)/\chi = K/i\hbar = -iK/\hbar : \chi(t) = A \exp(-iKt/\hbar)$$

Il s'agit d'une solution oscillante de pulsation $\omega = K/\hbar$, donc de fréquence de l'onde associée à la particule et son énergie la relation $E = \hbar \omega$, d'où l'identification de la constante K à l'énergie E de la particule :

$$\chi(t) = A \exp(-iEt/\hbar) = A \exp(-i\omega t/\hbar)$$

L'équation en variable x s'écrit :

$$-\hbar^2/2m d^2 \varphi / dx^2 + V(x) \varphi = E \varphi$$

ou encore

$$d^2 \varphi / dx^2 + 2m/\hbar^2 [E - V(x)] \varphi = 0$$

Ce qui représente l'équation de Schrödinger indépendante du temps, pour une particule de masse m dans un problème à une dimension de potentiel $V(x)$.

Cette équation pouvait s'obtenir en considérant les opérateurs associés à l'énergie potentielle $P^2_x / 2M$, et l'énergie potentielle $V(x)$ et en écrivant que E était une valeur propre de la somme de ces deux opérateurs :

On peut aisément généraliser en considérant une particule dans un espace à 2 ou 3 dimensions.

Dans R^3 , Energie potentielle $V(r)$

Equation de Schrödinger indépendante du temps.

$$\Delta \varphi + 2m/\hbar^2 [E - V(r)] \varphi = 0$$

$$\psi(r, t) = \varphi(r) \exp(-iEt/\hbar)$$

Dans le cas où l'on a plusieurs particules, on a une équation analogue. La fonction d'espace sera du type $\varphi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N)$, et l'on aura à considérer le Laplacien par rapport à chacune des coordonnées, $\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_N$. Le potentiel est une fonction des coordonnées de chacune des particules. D'où l'écriture :

$$\sum_i \Delta_i \varphi + 2m_i/\hbar^2 [E - V(r)] \varphi = 0$$

Conclusions

- Pour un système placé dans un potentiel indépendant du temps on sait donc écrire l'équation $E_C + E_P = E$, et en associant aux variables dynamiques les opérateurs correspondants.
- La résolution de l'équation de Schrödinger amène, en général, à trouver un ensemble de valeurs discrètes de l'énergie E_1, E_2, \dots, E_n .
- Toute l'information sur le système est contenue dans la connaissance de la fonction $\varphi(r)$.

- La fonction dépendante du temps s'écrit $\psi(r, t) = \varphi(r) \exp(-iEt/\hbar)$, ce qui ne fait qu'ajouter un facteur de phase.

Lorsque l'on considère l'équation dépendante du temps

$$-\hbar^2/2m \Delta\psi + V\psi = i\hbar \partial\psi(r, t) / \partial t,$$

il apparaît que toute combinaison linéaire de fonction solution est aussi solution :

$$-\hbar^2/2m \Delta\psi_1 + V\psi_1 = i\hbar \partial\psi_1(r, t) / \partial t \times c_1$$

$$-\hbar^2/2m \Delta\psi_2 + V\psi_2 = i\hbar \partial\psi_2(r, t) / \partial t \times c_2$$

$$-\hbar^2/2m \Delta\psi_3 + V\psi_3 = i\hbar \partial\psi_3(r, t) / \partial t \times c_3$$

$$-\hbar^2/2m \Delta\psi_N + V\psi_N = i\hbar \partial\psi_N(r, t) / \partial t \times c_N$$

$$\Sigma_i -\hbar^2/2m c_i \Delta\psi_i + V \Sigma_i c_i \psi_i = i\hbar \Sigma_i c_i \partial\psi_i(r, t) / \partial t$$

Mais on remarquera que si l'on considère l'équation qui donne la solution des états stationnaires, c'est-à-dire les solutions qui correspondent à un état de l'énergie, leurs combinaisons linéaires ne seraient solution que si elles correspondent à une même valeur de l'énergie.

Applications aux potentiels à une dimension

De nombreux problèmes de physique peuvent être modélisés par la recherche des états liés d'une particule de masse m , placée dans une énergie potentielle $V(x)$. Tels sont par exemple : l'étude des niveaux d'énergie d'une molécule diatomique, dont nombre de résultats peuvent être obtenus par l'étude d'un potentiel harmonique, $V(x) = 1/2 kx^2$, qui fera l'objet d'un chapitre particulier.

- le comportement des dopants dans les semi-conducteurs,
- le problème très schématisé d'une désintégration atomique, où l'on peut considérer une particule qui doit franchir une barrière de sortie du noyau,
- des renseignements peuvent être obtenus sur la conduction des métaux, en considérant les électrons libres du métal placés dans un potentiel périodique.

On pourrait ainsi multiplier les exemples. Dans ce chapitre seront présentés des résultats généraux et l'étude de potentiels simples. Rares sont les cas où l'on sait résoudre analytiquement l'équation de Schrödinger et on est souvent amené à faire appel à des méthodes de résolution approximatives isolées[3].

[3] telles que les méthodes perturbatives ou variationnelles

A. Généralités

1. Equation de Schrödinger - Potentiels à une Dimension

Le potentiel considéré n'est pas nécessairement continu. Il peut présenter des singularités de discontinuité

Dans le cas banal d'une fonction $V(x)$ définie analytiquement sur l'intervalle $[-,]$, on aura évidemment une seule équation de Schrödinger à écrire

$$d^2\varphi/dx^2 + 2m/\hbar^2(E - V(x)) \varphi = 0$$

Dans le cas où la fonction potentielle $V(x)$ a plusieurs déterminations analytiques, il y aura autant d'équations de Schrödinger à écrire que de régions de détermination de $V(x)$. La question qui se posera alors est celle du raccord des fonctions φ obtenues dans chaque région.

2. Symétrie

A priori, une forme de potentiel étant donnée, on est libre du choix des axes. Si un potentiel a une forme symétrique, on aura intérêt à choisir les axes qui rendent compte de cette symétrie. Ainsi, pour un potentiel symétrique $V(x) = V(-x)$, on peut énoncer le théorème suivant

Dans le cas d'un potentiel à une dimension symétrique, $V(x) = V(-x)$, les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires, soit impaires.

En effet, en raison de la symétrie du potentiel, les probabilités de présence sont les mêmes sur deux intervalles Δx centrés en des points symétriques

$|\varphi(x)|^2 \Delta x = |\varphi(-x)|^2 \Delta x$, ce qui veut dire que $\varphi(x) = \pm \varphi(-x)$, donc φ est de parité bien définie.

3. Raccord aux points de discontinuité

Si dans chacune des régions de sa définition $V(x)$ est continue, il en va de même de $\varphi(x)$ dans chacune des régions. Cependant, un problème se pose aux points de raccordement.

a. Discontinuité finie

On substitue à la fonction potentielle discontinue en x_0 , une fonction continue sur l'intervalle $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ et égale à $V(x)$ partout ailleurs.

Par déplacement continu de la fonction de substitution, on voit que la fonction φ va être continue.

Pour E donnée, on intègre $d^2\varphi/dx^2 + 2m/\hbar^2(E - V(x)) \varphi = 0$ sur l'intervalle $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$, la fonction $V(x)$ étant continue. $\int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} [d^2\varphi/dx^2 dx + 2m/\hbar^2(E - V(x)) \varphi] dx = 0$, ce qui donne $\varphi'(x_0 + \epsilon) - \varphi'(x_0 - \epsilon) + 2m/\hbar^2 \int_{x_0 - \epsilon}^{x_0 + \epsilon} (E - V(x)) \varphi dx = 0$

D'où le théorème suivant

En un point de discontinuité finie du potentiel $V(x)$, la fonction d'onde φ , solution de l'équation de Schrödinger et sa dérivée première φ' sont continues.

b. Discontinuité infinie

Supposons que pour $x > x_0$, V très grand et constant. La solution de l'équation

$$d^2\varphi/dx^2 + 2m/\hbar^2 (E - V) \varphi = 0$$

pour $x > x_0$ est $\varphi(x) = A e^{-\alpha x}$ avec $\alpha = 2m/\hbar^2 (V-E)^{1/2}$

Si $V \rightarrow \infty$, $\alpha \rightarrow \infty$, $\varphi \rightarrow 0$ donc $\varphi = 0$. La démonstration faite précédemment sur la dérivée de φ ne tient plus.

Théorème : Sur une paroi parfaitement réfléchissante ($V = \infty$) la fonction d'onde s'annule.

4. Fonctions propres - Valeurs propres

a. Dégénérescence

Examinons la possibilité de dégénérescence pour un potentiel à une seule dimension $V(x)$.

$$d^2\varphi/dx^2 + 2m/\hbar^2 (E - V(x)) \varphi = 0$$

Considérons deux solutions φ_1 et φ_2 de même énergie E .

$$d^2\varphi_1/dx^2 + 2m/\hbar^2 (V - E) \varphi_1 = 0$$

$$d^2\varphi_2/dx^2 + 2m/\hbar^2 (V - E) \varphi_2 = 0$$

$$\varphi_1'' \varphi_2 - \varphi_2'' \varphi_1 = 0 \quad \text{ou} \quad \varphi_1^3 \varphi_2 - \varphi_2^3 \varphi_1 = K$$

Comme on considère des états liés, $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_1', \varphi_2' \rightarrow 0$, donc $K = 0$, les fonctions φ_1, φ_2 sont donc proportionnelles.

Théorème - Dans un puits de potentiel à une dimension, il ne peut pas y avoir de dégénérescence.

Ce théorème est lui aussi une conséquence de la théorie des groupes, qui nous indique que pour les symétries des potentiels à une seule dimension $V(x)$ les représentations irréductibles sont de dimension 1, d'où l'impossibilité de dégénérescence. Une autre manière de voir les choses est

de dire que les dégénérescences naissent ou disparaissent avec un changement de symétrie.

Pour le potentiel $V(x)$, la seule symétrie possible est $V(x) = V(-x)$ qui n'a pas de conséquences sur E , mais seulement sur φ qui est paire ou impaire.

B. Puits de Potentiel Rectangulaires

Il est fréquent de pouvoir modéliser en physique l'étude d'un problème par celui d'une particule de masse m placée dans les limites sont marquées par un saut infini ou fini de potentiel. On parle de puits de potentiel rectangulaires.

Exemples de puits rectangulaire.

Il peut par exemple s'agir d'une particule dans un noyau, d'un système d'électrons π , ... Les résultats obtenus à une dimension se généralisent aisément à deux ou trois dimension.

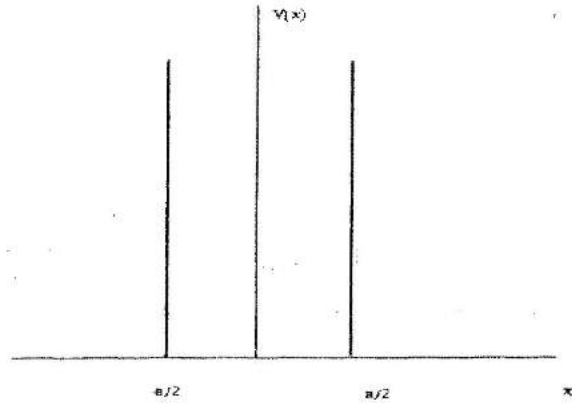
Boite à une dimension.

On considère une particule dans une région de potentiel constant et infini à l'extérieur, problème à une seule dimension - on a intérêt à rendre le problème symétrique par le choix des axes.

1. Boite à une dimension

On considère une particule de masse m , d'énergie E , dans un potentiel nul à l'intérieur de l'intervalle $[-a/2, a/2]$ et infini en dehors de cet intervalle.

$V(x) = 0$ pour $|x| < a/2$ et ∞ infini sinon. Le potentiel est pair.



Equation de Schrödinger

$d^2\varphi/dx^2 + 2m/h^2 E \varphi = 0$ soit $d^2\varphi/dx^2 + k^2 \varphi = 0$ avec $k^2 = 2m/h^2 E$.
 Les solutions sont du type fonction sinus, fonction cosinus, les solutions sont paires ou impaires, il ne peut y avoir mélange des deux.

Il y a une discontinuité de potentiel infinie aux points $x = \pm a/2$, la fonction d'onde doit donc s'y annuler; il suffit d'examiner la condition au point $a/2$ en raison de la parité.

Solution paire

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= A \cos kx \\ A \cos ka/2 &= 0 \\ 2mEa^2/4h^2 &= (2n_1 + 1)^2 \pi^2/4 \\ E_{n_1} &= (2n_1 + 1)^2 \pi^2 h^2 / 2m a^2 \end{aligned}$$

Solution impaire

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= A \sin kx \\ A \sin ka/2 &= 0 \\ 2mEa^2/4h^2 &= (2n_2)^2 \pi^2/4 \\ E_{n_2} &= (2n_2)^2 \pi^2 h^2 / 2m a^2 \end{aligned}$$

Pour une boîte à une dimension de largeur a , les valeurs de l'énergie sont données par $E = E_n = n^2 \pi^2 h^2 / 2m a^2$, n est un entier non nul, n pair correspond à une fonction d'onde impaire; n impair correspond à une fonction d'onde paire.

Il y a alternance de parité

n	1	2	3	4	5
$E_n / [n^2 \pi^2 h^2 / 2m a^2]$	1	4	9	16	25

Normalisation de la fonction d'onde

$$\int |\varphi(x)|^2 dx = 1 \text{ (intégrale étendue entre } -a/2 \text{ et } a/2)$$

Cas de la fonction paire

$$\int |A|^2 \cos^2 kx dx = 2|A|^2 \int [1 + \cos 2kx] dx = 1, \text{ soit } A = \sqrt{2}/a \text{ et } \varphi_p(x) = \sqrt{2}/a \cos kx$$

Cas de la fonction impaire : même résultat, soit $\varphi_i(x) = \sqrt{2}/a \sin kx$

Examen des résultats

- les fonctions d'onde sont alternativement paires et impaires, le niveau fondamental est pair.
- La valeur $n = 0$ est exclue. Il y a une raison physique profonde à ce phénomène. En fait, si $E = 0$ était une valeur permise de l'énergie, cela signifierait que l'énergie cinétique $p^2/2m$ de la particule est nulle partout à l'intérieur du puits puisque $V = 0$. Donc p serait parfaitement déterminé et serait nul, ce qui entraînerait une incertitude infinie sur la position de la particule incompatible avec sa localisation dans le puits où $\Delta x \approx a$. Donc $E = 0$ est une valeur strictement interdite par le principe d'incertitude d'Heisenberg.

Ce dernier exige que $\Delta x \Delta p \geq h$. Or la particule fait des allers-retours avec une quantité de mouvement p , donc $\Delta p \approx 2p$ et l'on doit avoir $2pa \geq h$, soit $p \geq h/2a$ et $E \geq h^2/8ma^2$, soit $E \geq E_1$. L'existence d'une « énergie de point zéro » comme on désigne E_1 est typique d'une particule confinée dans une région limitée et joue un rôle fondamental.

- Les énergies varient en $1/a^2$, si l'on diminue la dimension de la boîte, le niveau fondamental augmente. L'écart entre niveaux croît également si a diminue. Le caractère quantique du problème est d'autant plus marqué que la dimension de la boîte diminue.
- on notera cette idée qui se trouve en de nombreux problèmes de physique, si l'on cherche à localiser la particule, on a pour conséquence un accroissement d'énergie du fondamental. On parle d'énergie du point zéro.
- La longueur d'onde de de Broglie associée à la particule s'écrit $\lambda = h/hk$. Soit $\lambda^2 = h^2/2mE_n = h^2/8m a^2 / n^2$ d'où $n\lambda/2 = a$.

Sur la dimension de la boîte, on a donc un nombre entier de demi-longueurs d'onde, la longueur de de Broglie associée à la particule forme donc un système d'ondes stationnaires.

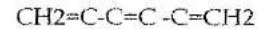
Exemple d'application de la boîte à une dimension

On peut par une modélisation simple du comportement des électrons p dans une molécule, retrouver les résultats concernant les spectres moléculaires de certaines espèces. Les molécules faites d'une alternance de simples et doubles liaisons ont un spectre optique qui se déplace avec la longueur de la chaîne. La fréquence est plus élevée pour une chaîne plus petite, le spectre se rapproche du visible si la longueur de la chaîne croît.

Exemples :

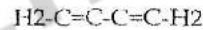


$$\lambda = 3190 \text{ \AA} \text{ (incolore)}$$



$$\lambda = 2490 \text{ \AA} \text{ (incolore)}$$

4 électrons π



(largeur $3a_0$)

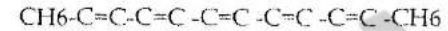
$$E_n = n^2 h^2 / 8m(3a)^2$$

$$\Delta E = (9 - 4) h^2 / 72ma^2$$

$$\Delta E_I = 6,9 \cdot 10^{-2} h^2 / ma^2$$

$$\Delta \nu_I = 6,9 \cdot 10^2 h / ma^2$$

$\Delta \nu_I > \Delta \nu_{II}$, partant de l'UV, on se déplace vers le visible en allongeant la chaîne.



$$\lambda = 4240 \text{ \AA} \text{ (orange)}$$

6 électrons π



(largeur $5a_0$)

$$E_n = n^2 h^2 / 8m(5a)^2$$

$$\Delta E = (16 - 9) h^2 / 200ma^2$$

$$\Delta E_{II} = 3,5 \cdot 10^{-2} h^2 / ma^2$$

$$\Delta \nu_{II} = 3,5 \cdot 10^2 h / ma^2$$

2. Puits de potentiel rectangulaire

On considère cette fois une particule de masse m , d'énergie E , dans un puits dont les parois ne sont plus infinies.

On fait un choix d'axes qui rend le problème symétrique

$V(x) = V_0$ pour $|x| > a$ et $V(x) = 0$ pour $|x| < a$ ($V_0 > 0$). Les solutions sont donc paires ou impaires, sans mélange. On se limitera au cas $0 < E < V_0$.

On a trois régions de détermination du potentiel, donc trois équations de Schrödinger à résoudre.

Région I : $d^2\varphi/dx^2 + 2m/h^2 (E - V_0) \varphi = 0$ soit $d^2\varphi/dx^2 - q^2 \varphi = 0$ avec $-q^2 = 2m/h^2 (E - V_0)$.

Région II : $d^2\varphi/dx^2 + 2m/h^2 E \varphi = 0$ soit $d^2\varphi/dx^2 + k^2 \varphi = 0$ avec $k^2 = 2m/h^2 E$

Région III : $d^2\varphi/dx^2 + 2m/h^2 (E - V_0) \varphi = 0$ soit $d^2\varphi/dx^2 - q^2 \varphi = 0$ avec $-q^2 = 2m/h^2 (E - V_0)$.

Les solutions ont les formes suivantes :

Région I : $\varphi(x) = A \exp(qx) + B \exp(-qx)$

Région II : $\varphi(x) = C \cos(kx) + D \sin(kx)$

Région III : $\varphi(x) = F \exp(qx) + G \exp(-qx)$

En utilisant le fait que l'on a un potentiel pair et que la fonction φ doit continuer partout et normalisable, il vient

Solutions paires

$$\varphi(x) = A \exp(qx)$$

$$\varphi(x) = C \cos kx$$

$$\varphi(x) = A \exp(-qx)$$

Solutions impaires

$$\varphi(x) = -A \exp(qx)$$

$$\varphi(x) = D \sin kx$$

$$\varphi(x) = A \exp(-qx)$$

$$A \cos ka/2 = 0$$

$$2mEa^2/4h^2 = (2n_1 + 1)^2 \pi^2/4$$

$$E_{n1} = (2n_1 + 1)^2 \pi^2 h^2 / 2m a^2$$

Il y a une discontinuité de potentiel finie aux points $x = \pm a$, la fonction d'onde et sa dérivée première doivent y être continues. En raison de la parité, il suffit d'examiner la condition au point $+a$.

Fonctions paires

$$A \exp -qa = C \cos ka$$

$$-qA \exp -qa = -kC \sin ka$$

$$\operatorname{tg} ka = q/k \text{ (avec } \operatorname{tg} ka > 0 \text{ *)}$$

- ces deux conditions résultent du fait que $E, k, q > 0$. Il est commode de faire apparaître $k^2 + q^2 = q_0^2 = 2mV_0/h^2$.

$$\operatorname{tg}^2 ka = q^2/k^2 \text{ (avec } \operatorname{tg} ka > 0 \text{ *)}$$

$$\sin^2 ka / \cos^2 ka = q^2/k^2 \text{ (} \operatorname{tg} ka > 0 \text{)}$$

$$\cos^2 ka = k^2/(k^2 + q^2) \text{ (} \operatorname{tg} ka > 0 \text{)}$$

$$|\cos \alpha| = \alpha/\alpha_0 \text{ (} \operatorname{tg} \alpha > 0 \text{)}$$

où l'on a posé $\alpha = ka$, $\alpha_0 = q_0 a$.

ce sont des équations transcendantes dont la résolution graphique permet d'obtenir les valeurs de E à partir de celles de α . Pour cela, il suffit de tracer les courbes des fonctions $\cos \alpha = \alpha/\alpha_0$ (avec $\operatorname{tg} \alpha > 0$), $|\sin \alpha| =$

$$A \sin ka/2 = 0$$

$$2mEa^2/4h^2 = (2n_2)^2 \pi^2/4$$

$$E_{n2} = (2n_2)^2 \pi^2 h^2 / 2m a^2$$

Fonctions impaires

$$-A \exp -qa = D \sin ka$$

$$-qA \exp -qa = kD \cos ka$$

$$\operatorname{tg} ka = -k/q \text{ (avec } \operatorname{tg} ka < 0 \text{ *)}$$

$$\operatorname{cotg}^2 ka = q^2/k^2 \text{ (avec } \operatorname{tg} ka < 0 \text{ *)}$$

$$\cos^2 ka / \sin^2 ka = q^2/k^2 \text{ (} \operatorname{tg} ka < 0 \text{)}$$

$$\sin^2 ka = k^2/(k^2 + q^2) \text{ (} \operatorname{tg} ka < 0 \text{)}$$

$$|\sin \alpha| = \alpha/\alpha_0 \text{ (} \operatorname{tg} \alpha < 0 \text{)}$$

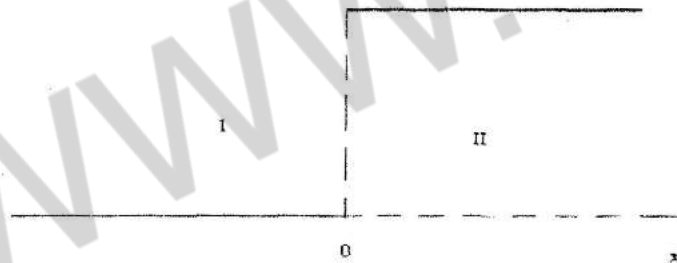
α/α_0 (avec $\text{tg } \alpha < 0$) et déterminer leurs points d'intersection avec la droite d'équation α/α_0 de pente $1/\alpha_0$.

Remarques

- Le problème admet toujours au moins une solution paire
- Si la largeur a augmente, la pente de la droite diminue et le nombre de solutions augmente, (même remarque si V_0 augmente)
- Si V_0 tend vers l'infini, on doit retrouver les mêmes résultats obtenus pour un puits infini. En effet, dans ces conditions, la pente de la droite s'annule et les solutions sont données simplement par les valeurs de a telles que $\alpha = n\pi/2$ (n entier > 0) ce qui donne $a^2 \alpha^2 = (n\pi/2)^2 = 2mE/h^2$ soit $E_n = h^2 (n\pi)^2 / 8m a^2$.

3. Marche de potentiel

On considère maintenant une particule de masse m , d'énergie E , qui rencontre au point $x = 0$ un saut de potentiel, de hauteur V_0 .



$V(x) = V_0$ pour $x > 0$ et $V(x) = 0$ pour $x < 0$ ($V_0 > 0$).

Cas $E < V_0$: réflexion totale

On a deux régions de détermination du potentiel, donc deux équations de Schrödinger à résoudre.

Région I : $d^2\varphi/dx^2 + 2m/h^2 E \varphi = 0$ soit $d^2\varphi/dx^2 - k^2 \varphi = 0$ avec $k^2 = 2m/h^2 E$.

Région II : $d^2\varphi/dx^2 + 2m/h^2 (E - V_0) \varphi = 0$ soit $d^2\varphi/dx^2 - q^2 \varphi = 0$ avec $-q^2 = 2m/h^2 (E - V_0)$.

Les solutions ont les formes suivantes :

Région I : $\varphi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$

Région II : $\varphi(x) = C \exp(-qx)$

En supposant que la particule se déplace de gauche à droite, l'onde incidente qui lui est associée est décrite par $A \exp(ikx)$. On peut fixer arbitrairement son amplitude à l'unité ($A = 1$)

Le potentiel présente une discontinuité finie en $x = 0$, la fonction φ et sa dérivée première doivent donc y être continues. Les conditions de raccordement s'écrivent, en $x = 0$:

$$1 + B = C$$

$$ik(1 - B) = -Cq$$

$$\text{d'où } B = -(1 + ik/q)/(1 - ik/q)$$

On remarque que $|B|^2 = 1$, c'est-à-dire que B peut s'écrire comme un facteur de phase $e^{-i\theta}$. Ceci montre que l'onde réfléchie décrite par $B \exp(-ikx) = e^{ikx - i\theta}$ a une intensité égale à celle de l'onde incidente : il y a donc réflexion totale sur la discontinuité de potentiel. Classiquement, une particule arrivant sur le saut de potentiel serait aussi réfléchie ; cependant le mouvement quantique présente deux différences importantes avec le mouvement classique :

- la probabilité de présence n'est pas nulle dans la région II, qui strictement inaccessible à la particule classique,
- si l'on construit un paquet d'ondes incident, on peut montrer (cf Messiah, p69-70) que la particule est réfléchiée avec un certain retard τ lié au déphasage de l'onde réfléchiée : $\tau = \hbar d\theta/dE$ tandis que la réflexion de la particule classique est instantanée.

Cas $E > V_0$: réflexion et transmission

En supposant que l'on cherche la solution telle que l'onde dans la région II se propage uniquement vers la droite (il n'y a pas d'autre obstacle dans cette région), les fonctions d'onde ont les formes suivantes :

Région I : $\varphi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$

Région II : $\varphi(x) = C \exp(ik'x)$

avec $k^2 = 2m/\hbar^2 E$, $k'^2 = 2m/\hbar^2 (V_0 - E)$.

Ecrivons les conditions de continuité de φ et de φ' en $x = 0$:

$$1 + B = C$$

$$ik(1 - B) = ik'C = ik'(1 + B)$$

$$\text{d'où } B = (k - k')/(k + k') \text{ et } C = 2k/(k + k')$$

Une particule classique franchirait automatiquement la discontinuité de potentiel. Ce n'est pas le cas en Mécanique quantique : il y a une probabilité $|B|^2$ de réflexion de la particule. $|B|^2 = R$ est le coefficient de réflexion, tandis que le coefficient de transmission T est naturellement $T = 1 - R$

$$R = (k - k')^2 / (k + k')^2 ; T = 4kk' / (k + k')^2 = 1 - R$$

Remarquer que T n'est pas égal à $|C|^2$, ce que l'on aurait eu tendance à écrire a priori. En effet, ce n'est pas la probabilité de présence qui doit se conserver, mais le flux (ou courant) de particules.



avant réflexion

après réflexion

Le flux entrant dans la région hachurée doit être égal au flux sortant, d'après la conservation du courant, d'où :

$$\hbar k/m = \hbar k/m |B|^2 + \hbar k'/m |C|^2$$

ce qui est bien vérifié si l'on porte dans (E. 6) les valeurs (E.4) trouvées pour A et B . Le coefficient de transmission n'est pas $|B|^2$ mais

$$T = k'/k |B|^2$$

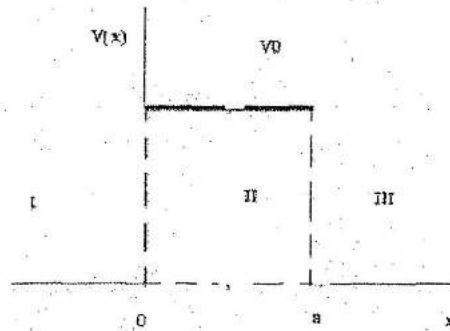
4. Effet tunnel.

Considérons une barrière de potentiel du type :

$$V(x) = 0 \quad x < 0 \text{ et } x > a$$

$$V(x) = V_0 \quad 0 < x < a$$

en nous plaçant dans le cas où $E < V_0$.



Si une particule classique d'énergie E se propageant vers la droite dans la région $x < 0$ arrive au point $x = 0$, elle va se trouver réfléchi instantanément en ce point, par contre la fonction d'onde de la particule quantique n'est pas nulle dans la région $0 < x < a$, et par conséquent sa probabilité de présence.

La particule a donc une chance d'être transmise dans la région III, qui est strictement inaccessible à la particule classique: cette possibilité de franchissement d'une barrière de potentiel alors que $E < V_0$ s'appelle *l'effet tunnel*.

Pour résoudre le cas de la barrière (E.8), on cherche la solution correspondant à une onde se propageant vers la droite dans la région III.

Région I : $\varphi(x) = \exp(ikx) + A \exp(-ikx)$

Région II : $\varphi(x) = B \exp(Kx) + C \exp(-Kx)$

Région III : $\varphi(x) = D \exp(ikx)$

Avec $K^2 = 2m/\hbar^2 (V_0 - E)$

Il suffit d'écrire les conditions de continuité en $x = 0$ et $x = a$ de φ et φ' .

Ces conditions donnent

$$1 + A = B + C$$

$$B \exp(Ka) + C \exp(-Ka) = D \exp(ika)$$

$$ik(1 - A) = K(B - C) \quad K(B \exp(Ka) - C \exp(-Ka)) = ikD \exp(ika)$$

De cela, on déduit :

$$D = 4ikK e^{-ika} / [(k + iK)^2 e^{Ka} + (k - iK)^2 e^{-Ka}]$$

Dans le cas où $Ka \gg 1$ on a simplement, pour le coefficient de transmission:

$$T = |D|^2 \approx 16 e^{-2Ka} (kK / k^2 + K^2)^{-2} \quad (E.10)$$

Le facteur essentiel dans (E.10) est l'exponentielle $\exp(-2Ka)$.

Une des applications intéressantes de l'effet tunnel est la radioactivité α , c'est-à-dire l'émission d'un noyau d'hélium 4 par un noyau lourd (Z, N)

$$(Z, N) \rightarrow (Z - 2, N - 2) + \alpha$$

où Z est le nombre de protons et N le nombre de neutrons du noyau initial. Comme exemple, citons la radioactivité du polonium 214 ($Z = 84$, $A = 214$)

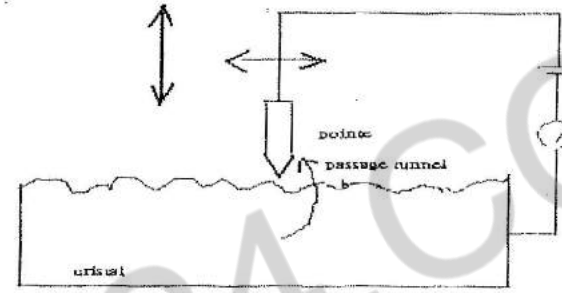
On peut faire une théorie approchée de la radioactivité en admettant que la particule préexiste dans le noyau; pour simplifier on ramène le problème à une dimension. Si R ($R = 7$ Fermis [43]) est le noyau; pour $|X| < R$, la particule sera soumise au potentiel nucléaire et au potentiel électrostatique répulsif existant entre le noyau d'He 4 et les protons du noyau final, que l'on peut représenter par une distribution de charge positive et uniforme dans la sphère de rayon R . Pour $|X| < R$, le potentiel nucléaire attractif l'emporte sur le potentiel électrostatique répulsif; par contre pour $|X| > R$, le potentiel nucléaire est négligeable, à cause de la courte portée des forces nucléaires. On aboutit ainsi à un potentiel représenté schématiquement sur la figure (pour $x > 0$) (pour $|X| > R$ le potentiel électrostatique est le potentiel coulombien $2(Z - 2)e^2 / |X|$). Connaissant l'énergie finale E de la particule, on peut calculer le coefficient de transmission de cette particule à travers la barrière de potentiel. Ce coefficient de transmission va évidemment déterminer la vie moyenne du

$$4[3] \text{ 1 Fermi} = 10^{-15} \text{ m.}$$

noyau, et comme la barrière dépend de R , on voit que l'on peut relier R et la vie moyenne, et par exemple se servir de cette méthode pour la détermination de R .

Cependant, bien que l'explication soit qualitativement correcte, la théorie exposée plus haut suppose des approximations très grossières et il ne faut pas trop s'attendre à des résultats très précis.

Deux autres applications spectaculaires de l'effet tunnel ont été couronnés par le prix Nobel dans ces dernières décennies. En 1973, B. Josephson a obtenu le prix Nobel pour la découverte de la jonction qui couple de façon cohérente deux fonctions d'onde macroscopiques dans des matériaux supraconducteurs séparés par une fine paroi isolante. En 1985, le prix fut attribué à G. Binnig et H. Rohrer, inventeurs du microscope à effet tunnel. Dans cet appareil, on déplace une pointe très fine près de la surface d'un échantillon conducteur. Les électrons peuvent passer par effet tunnel de la pointe à l'échantillon et cela produit un courant macroscopique qui permet d'effectuer une cartographie de haute résolution de la surface de l'échantillon. La variation extrêmement rapide de la fonction exponentielle $e^{-2\kappa a}$ dans le coefficient $|D|^2$ (proportionnel au courant), permet d'obtenir une résolution de l'ordre de 0,01 nm. En étendant cette technique, on peut également manipuler des atomes ou des molécules déposés sur la surface d'un cristal. Cette technologie augure de progrès considérables en nanoélectronique.



Principe d'un microscope à effet tunnel. On déplace la pointe fine au voisinage d'un cristal à l'aide de transducteurs piézo-électriques. Une boucle d'asservissement ajuste la distance de la pointe à la surface du cristal de façon que le courant provenant du passage d'électrons par effet tunnel soit constant. Le signal d'erreur de la boucle d'asservissement produit une cartographie directe de la distribution de densité électronique (en fait du potentiel électrostatique) à la surface du cristal.

Formalisme Mathématique

Ce chapitre est consacré au rappel de définitions relatives aux espaces vectoriels et de propriétés de ces espaces dont la connaissance est indispensable pour l'étude du formalisme général de la M.Q.

III Algèbre d'opérateurs

A- Opérateur linéaire

1. Définition

Un opérateur A est un être mathématique qui transforme un vecteur $|\psi\rangle$ en un autre $|\psi'\rangle$ tel que $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$.

Dans le cas où les vecteurs considérés sont des fonctions, on parle d'*opérateurs fonctionnels*.

Un opérateur A sera dit linéaire si :

$A(a_1|\psi_1\rangle + a_2|\psi_2\rangle) = a_1A|\psi_1\rangle + a_2A|\psi_2\rangle$ où a_1, a_2 sont deux scalaires quelconques.

Exemples :

Opérateur « position » X : $X\psi(x) = x\psi(x)$; x étant la position du système considéré.

Opérateur « impulsion » P_x : $P_x\psi(x) = \hbar/i \, d/dx \, \psi(x)$

Opérateur « potentiel » V(X) : $V(X)\psi(x) = V(x)\psi(x)$

Opérateur « énergie cinétique » T_x : $T_x\psi(x) = -\hbar^2/2m \, d^2/dx^2 \, \psi(x)$

N.B Dans ces exemples, on a considéré le cas d'un système quantique évoluant selon l'axe x'x.

Opérateurs non linéaires

$A = (\)^2 : A\psi(x) = (\psi(x))^2$

$A = \exp(\) : A\psi(x) = \exp(\psi(x))$

$A = // \ : A\psi(x) = // \psi(x) //^2$

2. Produit de deux opérateurs

Soient A, B deux opérateurs linéaires, le produit AB est défini par son action :

$|\psi''\rangle = A|\psi'\rangle = A(B|\psi\rangle) = AB|\psi\rangle$. Cela veut dire que c'est B qui agit le premier sur $|\psi\rangle$, ensuite A.

En général, $AB \neq BA$. L'opérateur $[A, B] = AB - BA$ est appelé « *commutateur* » des deux opérateurs.

Si $[A, B] = 0$, A et B commutent.

Exemples :

$$[\sqrt{\ }, 4] = -2\sqrt{\ }$$

$$[x, (\hbar/i) \, d/dx] = i \hbar$$

3. Représentation d'un opérateur par une matrice

Pour ceci, il faut choisir une base (représentation).

On considère une base orthonormée complète de E : $\{|u_i\rangle\}$

A opérateur linéaire agissant dans E : $A|\psi\rangle = |\psi'\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i b_i |u_i\rangle ; |\psi'\rangle = \sum_j b'_j |u_j\rangle$$

$$A(\sum_i b_i |u_i\rangle) = \sum_j b'_j |u_j\rangle$$

On projette cette égalité sur l'élément $|u_k\rangle$:

$$\sum_i b_i \langle u_k / A / u_i \rangle = \sum_j b'_j \langle u_k / u_j \rangle = \sum_j \delta_{jk} b'_j = b'_k$$

Ceci peut s'interpréter, quand on fait parcourir à k l'ensemble des indices comme une égalité matricielle, en introduisant la matrice A d'éléments $A_{ki} = \langle u_k / A / u_i \rangle$

En effet

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & \dots & \dots & \dots & A_{2n} \\ A_{31} & \dots & \dots & \dots & A_{3n} \\ \vdots & & & & \\ A_{n1} & \dots & \dots & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{pmatrix}$$

a. Définition

Etant donné un opérateur A d'un espace vectoriel E dont une base O.N.C est constituée des éléments $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots, |u_n\rangle$, on appelle matrice représentative de l'opérateur a la matrice d'éléments $A_{ij} = \langle u_i / A / u_j \rangle$ où i désigne le numéro de la ligne et j désigne le numéro de la colonne.

Remarque : La représentation d'un opérateur A n'est évidemment pas unique, à chaque famille de fonctions de base on associe une représentative d'éléments différents.

b. Eléments de matrice entre $\langle \phi /$ et $| \psi \rangle$

$$|\phi\rangle = \sum_i b_i |u_i\rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_j c_j |u_j\rangle$$

cherchons $\langle \phi | A | \varphi \rangle$.

$$|\phi\rangle = \sum_i b_i |u_i\rangle \longleftrightarrow \langle \phi | = \sum_i \langle u_i | b_i^* \left(\sum_i b_i^* \langle u_i | \right) A \left(\sum_j c_j |u_j\rangle \right)$$

$$\langle \phi | A | \varphi \rangle = \sum_i \sum_j b_i^* c_j \langle u_i | A | u_j \rangle$$

$$\langle \phi | A | \varphi \rangle = \sum_i \sum_j b_i^* c_j A_{ij}$$

c. Exemple d'opérateur linéaire : Projecteur

i) Projecteur sur un état $|\psi\rangle$:

$$P_\psi |\varphi\rangle = |\psi\rangle \langle \psi / \varphi \rangle \text{ proportionnel au ket } |\psi\rangle = \alpha |\psi\rangle$$

P_ψ est le projecteur sur l'état $|\psi\rangle$

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi / \psi \rangle \langle \psi /$$

$$\text{or } \langle \psi / \psi \rangle = 1 \text{ (} |\psi\rangle \text{ est normé) } P_\psi^2 = |\psi\rangle \langle \psi / = P_\psi$$

ii) Projecteur sur un sous-espace

Soient $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle, \dots, |\phi_q\rangle$ q vecteurs normés et orthogonaux les uns aux autres :

$$\langle \phi_i / \phi_j \rangle = \delta_{ij} ; i, j = 1, 2, \dots, q$$

Soit E_q un sous-espace de E sous-tendu par les q vecteurs $|\phi_i\rangle$.

$$\text{Soit l'opérateur } P_q = \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i /$$

Calculons $P_q^2 = \sum_i \sum_j |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \phi_j\rangle \langle \phi_j| = P_q$ (puisque $\langle \phi_i | \phi_j\rangle = \delta_{ij}$)

$= \delta_{ij}$)

P_q projette sur le sous-espace E_q

Et pour tout vecteur $|\psi\rangle$ de E_q , on a

$$P_q |\psi\rangle = \sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i | \psi\rangle$$

c'est-à-dire une superposition linéaire des projecteurs de $|\psi\rangle$ sur les différents états $|\phi_i\rangle$.

d. Relation de fermeture

Soit $\{|u_i\rangle\}$ une base O.N.C de E et $|\psi\rangle$ un état de E .

$|\psi\rangle$ se décompose de manière unique sur la base $\{|u_i\rangle\}$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

$$\dots = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \psi\rangle$$

$$\dots = \left(\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \right) |\psi\rangle$$

$|\psi\rangle$ étant quelconque : $\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = \mathbb{I}$

c'est la relation de fermeture dans la notation de Dirac. Elle traduit le fait que $|\psi\rangle$ s'écrit d'une manière et d'une seule sur la base considérée.

Considérons maintenant le cas d'une base O.N.C continue $\{|\alpha\rangle\}$ de E ; α indice continu.

Soit $|\psi\rangle$ un état de E :

$$|\psi\rangle = \int c(\alpha) |\alpha\rangle d\alpha ; \text{ avec } c(\alpha) = \langle \alpha | \psi\rangle$$

d'où la relation de fermeture pour cette représentation continue :

$$\int |\alpha\rangle \langle \alpha| d\alpha = \mathbb{I}$$

Exemples :

$$\text{Représentation } \{|p\rangle\} : \int |p\rangle \langle p| dp = \mathbb{I}$$

$$\text{Représentation } \{|x\rangle\} : \int |x\rangle \langle x| dx = \mathbb{I}$$

4. Opérateurs adjoints

a. Définition

A et A^+ sont dits adjoints si les matrices qui les représentent dans une représentation donnée sont adjointes l'une de l'autre :

$$\langle u_i | A | u_j\rangle = \langle u_j | A | u_i\rangle^* ; \text{ c'est-à-dire : } (A^+)_{ij} = A^*_{ji}$$

b. Conséquence

L'adjoint de l'état $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ est : $\langle \psi' | = \langle \psi | A^+$

Pour la démonstration, projetons cette égalité sur le vecteur de base $|u_i\rangle$:

$$\langle u_i | \psi'\rangle = \langle u_i | A | \psi\rangle$$

Introduisons la relation de fermeture :

$$\langle u_i | \psi'\rangle = \langle u_i | A | \mathbb{I} | \psi\rangle = \sum_j \langle u_i | A | u_j\rangle \langle u_j | \psi\rangle$$

Et écrivons ensuite les conjugués des deux membres :

$$\langle u_i / \psi \rangle^* = \langle u_i / A \psi \rangle^* = \sum_j \langle u_i / A / u_j \rangle^* \langle u_j / \psi \rangle^*$$

$$\langle \psi' / u_i \rangle = \langle u_i / A \psi \rangle = \sum_j \langle u_i / A / u_j \rangle \langle \psi / u_j \rangle = \sum_j \langle \psi / u_j \rangle \langle u_j / A^+ / u_i \rangle$$

$$\langle \psi' / u_i \rangle = \langle \psi / A^+ / u_i \rangle \Leftrightarrow \langle \psi' / = \langle \psi / A^+$$

$$\begin{array}{c} / \psi \rangle \text{-----} A \text{-----} \\ \text{---} / \psi' \rangle = A / \psi \rangle \text{ dans } E \end{array}$$

Opérations
adjointes

$$\begin{array}{c} / \psi \rangle \text{-----} \\ \text{---} / \psi' \rangle = A / \psi \rangle \text{ dans } E \end{array}$$

$$\begin{array}{c} \langle \psi / \text{-----} A^+ \text{-----} \\ \text{---} \langle \psi' / = \langle \psi / A^+ \text{ dans } E^* \end{array}$$

c. Propriétés des A^+

$$(A^+)^+ = A$$

$$(\alpha A)^+ = \alpha^* A^+$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+$$

$$[\exp(A)]^+ = \exp(A^+)$$

$$(AB)^+ = B^+ A^+ \text{ En effet : Soit } / \psi \rangle = A / \phi \rangle \text{ et } / \phi \rangle = B / \theta \rangle \text{ c'ad}$$

$$/ \psi \rangle = A(B / \theta \rangle) = AB / \theta \rangle$$

$$\text{et les expressions adjointes sont : } \langle \psi' / = \langle \phi' / A^+ \text{ et } \langle \phi' / =$$

$$\langle \theta' / B^+ \text{ c'ad } \langle \psi' / = \langle \theta' / B^+ A^+$$

Plus généralement, on obtient l'expression adjointe d'une expression donnée en inversant l'ordre des facteurs, en changeant les kets par les bras et les bras par les kets, en remplaçant les opérateurs par leurs adjoints et les nombres par leurs conjugués. L'ordre de ces derniers n'est pas important.

Exemples :

$$(\alpha / u \rangle \langle v /)^+ = \alpha^* / v \rangle \langle u /$$

$$[\lambda / \phi \rangle \langle \psi / [A + BC] / \psi \rangle \langle \omega / \theta \rangle]^+ = \lambda^* \langle \theta' / \omega \rangle \langle \psi' / [A^+ + C^+ B^+] / \psi \rangle \langle \phi' /$$

B. Opérateurs hermitiques (auto-adjoints)

C'est une classe très importante d'opérateurs en M.Q. Ils correspondent aux opérateurs associés aux grandeurs physiques.

1. a. Définition : Un opérateur A est hermitique si $A = A^+$

b. Conséquence : $\langle \phi' / A / \psi \rangle = \langle \phi' / A \psi \rangle = \langle A \phi' / \psi \rangle$

c. Exemples : $P_\psi / = / \psi \rangle \langle \psi' / = P_\psi^+$

$$X, P_x, \Delta_x, \dots$$

2. Décomposition spectrale d'un opérateur hermitique

2.a. Valeurs propres d'un opérateur

Un vecteur $/u_n \rangle$ est un vecteur propre de l'opérateur A si il existe un scalaire a_n tel que : $A / u_n \rangle = a_n / u_n \rangle$; a_n est appelé *valeur propre* de A associée au *vecteur propre* $/u_n \rangle$.

L'ensemble $\{a_n\}$ des valeurs propres de A est appelé *spectre* de A .

Si $|u_n\rangle$ est vecteur propre de A de valeur propre a_n alors $\lambda|u_n\rangle$ ($\lambda \in \mathbb{C}$) est également vecteur propre de A associé à la même valeur propre a_n : $A(\lambda|u_n\rangle) = a_n(\lambda|u_n\rangle)$.

Si les vecteurs propres de A sont normés $\langle u_n|u_n\rangle = 1$ alors λ doit être un facteur de phase de module 1 et l'on peut écrire $\lambda = e^{i\theta}$, ($\theta \in \mathbb{R}$).

Les vecteurs qui ne diffèrent que par un facteur de phase de module un caractérisent le même état quantique.

2.b. Dégénérescence

a_n est dite valeur propre *non dégénérée* s'il lui correspond un seul vecteur propre $|u_n\rangle$ (au facteur α près) ; c'est à dire que les vecteurs propres associés à a_n sont tous colinéaires entre eux.

A_n est *dégénérée* s'il lui correspond au moins deux vecteurs propres différents ; c'est à dire non colinéaires (orthogonaux).

Supposons a_n que est dégénérée, cela veut dire qu'il existe g_n vecteurs propres non colinéaires associés à a_n :

$$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$$

L'indice i est appelé *indice de dégénérescence* de la valeur propre a_n . Il peut prendre les valeurs allant de 1 jusqu'à g_n . g_n correspond au *degré de dégénérescence* de cette valeur propre a_n .

L'ensemble de vecteurs propres ($i=1, 2, \dots, g_n$) engendre un sous-espace E_n appelé *sous-espace propre de a_n* ou *espace de dégénérescence de a_n* .

En fait, l'ensemble $\{|u_n^i\rangle\}$ constitue une base orthonormée de l'espace E_n et tout vecteur $|f\rangle$ de cet espace peut se décomposer sur cette base :

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^{g_n} c_i |u_n^i\rangle$$

Et

$$A|f\rangle = A \sum_i c_i |u_n^i\rangle = \sum_i c_i A|u_n^i\rangle = \sum_i c_i a_n |u_n^i\rangle = a_n |f\rangle$$

3. Equation caractéristique de l'opérateur A

Il s'agit de répondre à la question suivante : existe-t-il un scalaire λ et un vecteur $|\psi\rangle$ tels que : $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$.

Projetons donc sur un élément $|u_i\rangle$ de la base O.N.C. $\{|u_n\rangle\}$:

$$\langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle$$

et introduisons la relation de fermeture $\sum_j |u_j\rangle\langle u_j| = \mathbb{I}$

$$\sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \lambda \langle u_i|\psi\rangle$$

$$\text{avec : } \langle u_i|A|u_j\rangle = A_{ij} ; \langle u_j|\psi\rangle = c_j ; \langle u_i|\psi\rangle = \sum_j c_j \delta_{ij}$$

d'où l'équation :

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

On aura un système linéaire de n équation et n inconnues c_j :

$$\begin{pmatrix} (A_{11} - \lambda) & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & (A_{22} - \lambda) & & & A_{2n} \\ A_{31} & & (A_{33} - \lambda) & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ A_{n1} & & & & (A_{nn} - \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

La recherche des valeurs propres et vecteurs propres de l'opérateur A se ramène donc à la recherche de valeurs propres et vecteurs propres de la matrice représentative de A.

Ce système possède des solutions autres que tous les $c_j = 0$ (solutions non triviales) si

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

C'est l'équation caractéristique de l'opérateur A (équation séculaire). C'est une équation de degré n en λ dont les racines sont les valeurs propres de A.

4. Valeurs propres et vecteurs propres d'un opérateur hermitique

4.a. Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.

A hermitique : $A = A^+$; $A/u_n \rangle = a_n / u_n \rangle$

$$\langle u_n / A / u_n \rangle = a_n \langle u_n / u_n \rangle$$

$$\langle u_n / A / u_n \rangle^* = a_n^* \langle u_n / u_n \rangle$$

A hermitique $\Leftrightarrow A_{nn} = A_{nn}^*$; $\langle u_n / u_n \rangle \geq 0$

$a_n = a_n^*$, a_n est donc réel.

Conséquence :

$$A / u_n \rangle = a_n / u_n \rangle$$

$$\langle u_n / A^+ = \langle u_n / a_n^*$$

$$A = A^+ \Rightarrow \langle u_n / A = \langle u_n / a_n = a_n \langle u_n /$$

Exemple : $\langle \phi / A / u_n \rangle = a_n \langle \phi / u_n \rangle$

$$\langle u_n / A / \phi \rangle = a_n \langle u_n / \phi \rangle$$

4.b. Deux vecteurs propres correspondant à deux valeurs propres différentes sont orthogonaux (pour un opérateur hermitique).

$$A / u_n \rangle = a_n / u_n \rangle ; A / u_p \rangle = a_p / u_p \rangle ; \text{ avec } a_n \neq a_p \text{ et } A = A^+$$

$$\langle u_p / A / u_n \rangle = a_n \langle u_p / u_n \rangle = a_p \langle u_p / u_n \rangle$$

$(a_n - a_p) \langle u_p / u_n \rangle = 0$ or $a_n \neq a_p$ donc $\langle u_n / u_p \rangle = 0$ c'est à dire que $/u_n \rangle$ et $/u_p \rangle$ sont orthogonaux.

C. Définition d'une observable

1. Définition

Une observable est un opérateur hermitique dont le système de vecteurs propres forme une base orthonormée et complète de l'espace des états E.

$$A / u_n^i \rangle = a_n / u_n^i \rangle ; A = A^+$$

Les $\{ /u_n^i \rangle \}$ forment une B.O.N.C \Leftrightarrow

$$\left\{ \begin{array}{l} \langle u_n^i / u_n^j \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij} \\ \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} / u_n^i \rangle \langle u_n^i / = \Pi \end{array} \right. \text{ dans } E$$

Et pour n donné $\left\{ \begin{array}{l} \langle u_n^i / u_n^j \rangle = \delta_{ij} \\ \sum_{i=1}^{g_n} / u_n^i \rangle \langle u_n^i / = \Pi_n \end{array} \right. \text{ dans } E_n$

Remarque : l'observable A peut s'écrire
 $A = \sum_n a_n P_n$; $P_n = \sum_i / u_n^i \rangle \langle u_n^i /$

2. Exemples d'observables

2.a. Projecteurs : $P_\psi = / \psi \rangle \langle \psi /$; $\langle \psi / \psi \rangle = 1$

i) $P_\psi = P_\psi^+$ hermitique

ii) Vecteurs propres et valeurs propres : $P_\psi / \varphi \rangle = \lambda / \varphi \rangle$

Or $P_\psi^2 = P_\psi \Leftrightarrow \lambda^2 = \lambda \Leftrightarrow \lambda(\lambda-1) = 0$ deux valeurs propres possibles $\lambda = 0$ et $\lambda = 1$.

à $\lambda = 1$ correspond le vecteur propre $/ \psi \rangle$ tel que $P_\psi / \psi \rangle =$

à $\lambda = 0$ correspond le vecteur $/ \psi_\perp \rangle$ orthogonal à $/ \psi \rangle$: $\langle \psi_\perp / \psi \rangle = 0$

$/ \psi \rangle \langle \psi / + / \psi_\perp \rangle \langle \psi_\perp / = \Pi$ (relation de fermeture satisfaite), c'est à dire

que les deux vecteurs propres forment une B.O.N.C.

2.b. Opérateur position X

i) Définition : $/ \psi \rangle$

$$/ \psi' \rangle = X / \psi \rangle$$

ii) Action de l'opérateur X dans la représentation $\{ / x \rangle \}$:

En projetant sur un vecteur de la représentation $\{ / x \rangle \}$
 $\langle x / \psi' \rangle = \langle x / X / \psi \rangle$

Et par définition, l'on a $\langle x / X / \psi \rangle = x \langle x / \psi \rangle$ où x désigne la position du système sur l'axe x'x.

Cela veut dire que : $\psi'(x) = x \psi(x)$.

iii) X est hermitique : c'est à dire que l'on a
 $\langle \phi / X / \psi \rangle = \langle \psi / X / \phi \rangle^*$

Pour cela, introduisons la relation de fermeture

$$\int / x \rangle \langle x / dx = \Pi$$

$$\langle \phi / \Pi X / \psi \rangle = \langle \phi (\int / x \rangle \langle x / dx) X / \psi \rangle = \int$$

$$\langle \phi / x \rangle \langle x / X / \psi \rangle dx$$

$$\left[\int \langle \phi / x \rangle x \langle x / \psi \rangle dx = \left[\int \langle x / \phi \rangle x \langle \psi / x \rangle dx \right]^* = \left[\int x \langle \psi / x \rangle \langle x / \phi \rangle dx \right]^* \right]^*$$

$$\left[\int \langle \psi / x \rangle \langle x / X / \phi \rangle dx \right]^* = \left[\langle \psi / \int / x \rangle \langle x / dx \rangle X / \phi \rangle \right]^* = \langle \psi / \Pi X / \phi \rangle^* = \langle \psi / X / \phi \rangle^*$$

iv) Vecteurs propres et valeurs propres de X

Existe-t-il un vecteur $/ \rho \rangle$ et un scalaire l tels que : $X / \rho \rangle = \lambda / \rho \rangle$?

Pour cela, considérons l'action de X sur un vecteur $/ x' \rangle$ de la représentation $\{ / x \rangle \}$: $\langle x / X / x' \rangle = x \langle x / x' \rangle = x \delta(x-x')$ relation d'orthonormalisation en

représentation $\{|x\rangle\}$. D'autre part, on a pour la distribution de Dirac :

$a\delta(x-a) = x\delta(x-a)$ et $\delta(x-a) = \delta(a-x)$. D'où

$$\langle x|X|x'\rangle = x \langle x|x'\rangle = x \delta(x-x') = x'\delta(x'-x) = x'\langle x'|x\rangle$$

c'est à dire

$$\langle x|x'\rangle = x'/x' \text{ ou encore } \langle X|x\rangle = x/x$$

Donc, en représentation $\{|x\rangle\}$, les vecteurs propres de X sont les $|x\rangle$ et les valeurs propres correspondantes sont les x .

Ces vecteurs satisfont les relations d'orthonormalisation et de fermeture, Ils forment une base O.N.C et X est bien une observable.

2.c. Opérateur impulsion P

i) Définition : $|p\rangle$ / $\langle p|\psi\rangle = P|\psi\rangle$

ii) Action de l'opérateur P dans la représentation $\{|p\rangle\}$:

En projetant sur un vecteur de la représentation $\{|p\rangle\}$

$$: \langle p|\psi'\rangle = \langle p|P|\psi\rangle$$

Et par définition, l'on a $\langle p|P|\psi\rangle = p \langle p|\psi\rangle$ où x désigne l'impulsion du système sur l'axe x^2x .

Cela veut dire que : $\psi'(p) = p \psi(p)$.

iii) P est hermitique : c'est à dire que l'on a $\langle \phi|P|\psi\rangle = \langle \psi|P|\phi\rangle^*$

Pour cela, introduisons la relation de fermeture

$$\int |p\rangle\langle p| dp = \mathbb{I}$$

$$\langle \phi|\mathbb{I} P|\psi\rangle = \langle \phi | \int |p\rangle\langle p| dp P|\psi\rangle = \int \langle \phi|p\rangle\langle p|P|\psi\rangle dp$$

iii) P est hermitique : c'est à dire que l'on a $\langle \phi|P|\psi\rangle = \langle \psi|P|\phi\rangle^*$

Pour cela, introduisons la relation de fermeture

$$\int |p\rangle\langle p| dp = \mathbb{I}$$

$$\langle \phi|\mathbb{I} P|\psi\rangle = \langle \phi | \int |p\rangle\langle p| dp P|\psi\rangle = \int \langle \phi|p\rangle\langle p|P|\psi\rangle dp$$

$$\int \langle \phi|p\rangle p \langle p|\psi\rangle dp = [\int \langle p|\phi\rangle p \langle \psi|p\rangle dp]^* = [\int p \langle \psi|p\rangle \langle p|\phi\rangle dp]^*$$

$$[\int \langle \psi|p\rangle \langle p|P|\phi\rangle dp]^* = [\langle \psi | (\int |p\rangle\langle p| dp) P|\phi\rangle]^* = \langle \psi|\mathbb{I} P|\phi\rangle^* = \langle \psi|P|\phi\rangle^*$$

iv) Vecteurs propres et valeurs propres de P

Par une procédure similaire à celle concernant l'observable X , on peut facilement montrer qu'en représentation $\{|p\rangle\}$, les vecteurs propres de P sont les $|p\rangle$ et les valeurs propres correspondantes sont les impulsions p .

Ces vecteurs $|p\rangle$ satisfont les relations d'orthonormalisation et de fermeture, Ils forment une base O.N.C et P est bien une observable.

v) Action de l'opérateur P dans la représentation $\{|x\rangle\}$:

$$\langle x|P|\psi\rangle = ?$$

$$\begin{aligned}
 \langle x/P/\psi \rangle &= \langle x/\Pi P/\psi \rangle = \langle x(\int / p \rangle \langle p/P/\psi \rangle \\
 &= \int \langle x/p \rangle \langle p/P/\psi \rangle dp \\
 &= \int \langle x/p \rangle p \langle p/\psi \rangle dp = \int v_p(x) \psi(p) dp \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int p \bar{\psi}(p) e^{ipx-\hbar} dp \\
 &= TF^{-1}[p\psi(p)]
 \end{aligned}$$

Or $TF^{-1}[p\bar{\psi}(p)] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x)$ (cf Propriétés des TF)

Et en reprenant les notations de Dirac :

$$\langle x/P/\psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle x/\psi \rangle$$

L'action de P en représentation $\{|x\rangle\}$ se traduit donc par l'opération dérivée \hbar/i au facteur multiplicatif \hbar/i près.

3. Généralisation de la notion d'observables

En général, un opérateur A hermitique, possède un spectre en partie discret et en partie continu.

$$A|u_n\rangle = a_n |u_n\rangle ; n = 1, 2, \dots$$

$$A|u_\alpha\rangle = a(\alpha) |u_\alpha\rangle ; \alpha (-\infty \rightarrow +\infty)$$

♦ Relation d'O.N $\langle u_n/u_n \rangle = \delta_{nn} ; \langle u_\alpha/u_\alpha \rangle = \delta(\alpha-\alpha')$

♦ Relation de fermeture $\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| + \int |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha| d\alpha = \Pi$

D. Propriétés des observables qui, commutent

1. Théorème fondamental I

Si deux observables A et B commutent, elles admettent un système de vecteurs propres communs et réciproquement.

Démonstration :

Théorème direct :

Soient deux observables A et B telles que $[A, B] = 0$.

Soient $\{|v_n^i\rangle\}$ les vecteurs propres de A de valeur propre a_n ($i = 1, 2, \dots, g_n$) ; g_n degré de dégénérescence de la v.p a_n .

Les g_n vecteurs $\{|v_n^i\rangle\}$ engendrent un sous-espace \mathcal{E}_n .

$$A|v_n^i\rangle = a_n |v_n^i\rangle$$

$[A, B]|v_n^i\rangle = 0 \Rightarrow A(B|v_n^i\rangle) = a_n (B|v_n^i\rangle)$ c'est-à-dire que $B|v_n^i\rangle$ est vecteur propre de A avec la v.p a_n ou encore que $B|v_n^i\rangle$ est un vecteur de l'espace \mathcal{E}_n .

Or \mathcal{E}_n est invariant ou stable (i-e $\forall |v\rangle \in \mathcal{E}_n, B|v\rangle \in \mathcal{E}_n$) sous l'effet de B, on peut donc résoudre le problème aux valeurs propres de B dans \mathcal{E}_n c'est-à-dire qu'on peut diagonaliser B dans \mathcal{E}_n .

Soit $\{|v_{n,p}^j\rangle\}$ l'ensemble des vecteurs propres de B correspondant à une valeur propre b_p :

$$B|v_{n,p}^j\rangle = b_p |v_{n,p}^j\rangle$$

n : indique qu'on travaille dans \mathcal{E}_n .

p : relatif à la v.p b_p de B.

j : indice de dégénérescence de la vp b_p ($j = 1, 2, \dots, b_p$)

Or $\{|v_{n,p}^j\rangle\} \in \mathcal{E}_n$, donc les $\{|v_{n,p}^j\rangle\}$ sont des vecteurs propres de A avec la valeur propre a_n et aussi vecteurs propres de B avec la valeur propre b_p :

$$A |v_{n,p}^j\rangle = a_n |v_{n,p}^j\rangle$$

$$B |v_{n,p}^j\rangle = b_p |v_{n,p}^j\rangle$$

c'est-à-dire que les $\{|v_{n,p}^j\rangle\}$ sont des vecteurs propres communs à A et B.

Théorème réciproque :

On connaît les vecteurs propres $\{|v_{n,p}^j\rangle\}$ communs à A et B :

$$\begin{aligned} AB |v_{n,p}^j\rangle &= a_n b_p |v_{n,p}^j\rangle \\ AB |v_{n,p}^j\rangle &= a_n b_p |v_{n,p}^j\rangle \Rightarrow [A, B] |v_{n,p}^j\rangle = 0 \end{aligned}$$

Or $\{|v_{n,p}^j\rangle\}$ vecteurs de base, donc $[A, B] = 0$

Conséquence :

Soit une observable $D = A + B$ avec $[A, B] = 0$

Soit $[A, B] = 0$ le système de vecteurs propres communs à A et B

$$\begin{aligned} A |v_{n,p}^j\rangle &= a_n |v_{n,p}^j\rangle & (A+B) |v_{n,p}^j\rangle &= (a_n + b_p) |v_{n,p}^j\rangle \\ B |v_{n,p}^j\rangle &= b_p |v_{n,p}^j\rangle & \Rightarrow D |v_{n,p}^j\rangle &= (a_n + b_p) |v_{n,p}^j\rangle \end{aligned}$$

2. Théorème fondamental II

Si deux observables A et B commutent et si $|u_1\rangle$ et $|u_2\rangle$ sont deux vecteurs propres de A avec des valeurs propres a_1 et a_2 différentes, alors $\langle u_1 | B | u_2 \rangle = 0$ (i.e $B | u_2 \rangle$ est orthogonal à $| u_1 \rangle$).

Démonstration :

$$[A, B] = 0 \Rightarrow \langle u_1 | [A, B] | u_2 \rangle = 0$$

$$\langle u_1 | AB | u_2 \rangle - \langle u_1 | BA | u_2 \rangle = 0$$

$$(a_1 - a_2) \langle u_1 | B | u_2 \rangle = 0$$

Et puisque $a_1 \neq a_2$, il vient $\langle u_1 | B | u_2 \rangle = 0$. Cela veut dire que les vecteurs $B | u_2 \rangle$ et $| u_1 \rangle$ sont orthogonaux.

3. Définition d'un ensemble d'observables qui commutent (ECOC)

Une suite d'observables A, B, C, ... forment un ECOC si

- i) toutes les observables A, B, C, .. commutent deux à deux,
- ii) chaque vecteur propre $|n, m, p, ..\rangle$ de leur système de base commun est défini de façon unique par la donnée des valeurs propres $a_n, b_m, c_p, ..$, correspondantes de A, B, C, ...

Définition équivalente :

Un ensemble d'observables a, B, C,.. forme un ECOC s'il existe une base orthonormée de vecteurs propres communs et si cette base est unique (aux facteurs de phase près).

Intérêt des ECOC

L'état dynamique d'un système quantique est complètement connu si l'on a réussi à déterminer de façon précise les paramètres (vecteurs et valeurs propres) des ECOC de variables compatibles qui lui sont attachées.

Enfin, on peut affirmer que le nombre d'opérateurs formant un ECOC est égal au nombre de degrés de liberté du système.

$$X|x, y\rangle = x|x, y\rangle$$

$$Y|x, y\rangle = y|x, y\rangle$$

Exemples :

a) Soit A une observable : $A|u_n\rangle = a_n|u_n\rangle$

$\{|u_n\rangle\}$ base de \mathcal{E}

i) supposons a_n non dégénérée : à a_n correspond un vecteur propre unique $|u_n\rangle$

(au facteur près). Alors A est un E.C.O.C.

ii) a_n dégénérée $\Rightarrow A|u'_n\rangle = a_n|u'_n\rangle$ ($i=1, 2, 3, \dots, g_n$).

\mathcal{E}_n sous espace propre de a_n ; à $a_n \rightarrow g_n$ vecteurs propres $|u'_n\rangle$
donc A n'est pas un E.C.O.C.

b) une particule se déplaçant sur l'axe $x'Ox$:

on considère donc une observable X : X définit un ECOC dans l'espace \mathcal{E}_x :

*) $X|x\rangle = x|x\rangle$

*) à la v.p correspond un seul vecteur propre $|x\rangle$

*) X commute avec lui même.

c) une particule se déplaçant dans le plan xOy : \mathcal{E}_{xy}

observable Y : $Y|y\rangle = y|y\rangle$

X tout seul ne constitue pas un ECOC dans \mathcal{E}_{xy} .

Mais X et Y peuvent constituer ensemble un ECOC dans \mathcal{E}_{xy}

car :

X et Y commutent,

au couple de valeurs propres (x, y) correspond un seul vecteur propre $|x, y\rangle$

si l'on échange ces deux particules.

Postulats de la Mécanique Quantique

I-INTRODUCTION

Les postulats de la M.Q comme ceux d'ailleurs de toute théorie physique, doivent permettre de répondre à trois questions fondamentales :

- 1) Comment décrire l'état dynamique d'un système à un instant donné ?
- 2) Comment, pour un état donné, prévoir les résultats des mesures des diverses grandeurs physiques associées au système ?
- 3) Comment déterminer l'état d'un système à un instant t quelconque, connaissant cet état à un instant ultérieur t_0 ?

En outre ces postulats doivent satisfaire un certain nombre de contraintes :

- a) les valeurs des grandeurs ayant un sens physique sont réelles.
- b) les inégalités de Heisenberg imposent que l'état du système définisse un spectre de valeurs pour chaque grandeur physique (sauf pour les états propres qui correspondent chacun à une valeur unique). Il existe des couples de grandeurs physiques incompatibles (ex : position-impulsion) dont les largeurs spectrales sont corrélées par des inégalités de type Heisenberg.

II-DESCRIPTION DE L'ETAT D'UN SYSTEME

Postulat n°1 : Espace des états et vecteurs d'état

Les états accessibles à un système physique donné forment un espace vectoriel ξ appelé espace des états, à un instant t_0 donné, l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un 'Ket' ou vecteur d'état $|\psi(t_0)\rangle$, appartenant à l'espace vectoriel des états ξ .

Postulat n°2 : Probabilité de transition

A tout couple de Ket, $|\psi\rangle$, $|\phi\rangle$, on associe un nombre complexe, noté $\langle\phi|\psi\rangle$, et appelé amplitude de probabilité de transition de $|\psi\rangle$ à $|\phi\rangle$, qui a les propriétés d'un produit scalaire dans l'espace des états ξ . Son module au carré, $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ est la probabilité de transition de l'état $|\psi\rangle$ à l'état $|\phi\rangle$.

III- DESCRIPTION DES GRANDEURS PHYSIQUES

Postulat n°3 : Grandeurs physiques et observables

Toute grandeur physique δ est décrite par une application linéaire A agissant dans l'espace des états ξ appelée opérateur. Les grandeurs physiques mesurables sont associées à des opérateurs particuliers (hermitiques), appelés observables.

IV- MESURE DE GRANDEURS PHYSIQUES

Postulat n°4 : Résultats de la mesure

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

Remarques :

- Le fait que A soit hermitique assure que le résultat de la mesure soit un nombre réel.
- Certaines grandeurs physiques sont quantifiées ; leurs spectres de valeurs propres sont discrets.

V-PROBABILITES DES RESULTATS

Postulat n°5 : Probabilité d'un résultat de mesure

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

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

si a_n est une valeur propre non dégénérée, associée au vecteur propre normé

$|\phi_n\rangle$, ou :

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

si a_n est une valeur propre dégénérée, associée aux g_n vecteurs propres normés $|\phi_n^i\rangle$.

Postulat n°6 : « Mesurer, c'est perturber ! »

Lorsque la mesure de la grandeur physique δ sur un système dans l'état normé $|\psi\rangle$, donne comme résultat la valeur propre a_n de l'observable A correspondante, l'état du système immédiatement après la mesure est la « projection normée de $|\psi\rangle$ sur le sous espace propre associé à a_n », soit :

$$|\psi'\rangle_{(\text{après})} = |\phi_n\rangle$$

si a_n est une valeur propre non dégénérée, associée au vecteur propre normé $|\phi_n\rangle$, ou :

$$|\psi'\rangle_{(\text{après})} = \frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}} \quad ; \quad \langle \psi | P_n | \psi \rangle = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \phi_n^i | \psi \rangle|^2$$

si a_n est une valeur propre dégénérée, associée aux g_n vecteurs propres normés $|\phi_n^i\rangle$.

(P_n est le projecteur sur le sous espace propre de a_n :

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

Remarque :

La perturbation de l'état du système introduite par la mesure n'est pas une spécificité quantique. Elle existe aussi en physique classique. Ce qui est spécifiquement quantique c'est que la perturbation

quantique ne peut être réduite en améliorant la technique de mesure, c'est une perturbation inhérente à la notion même de la mesure.

VII- EVOLUTION DE L'ETAT D'UN SYSTEME

Postulat n°7 : Equation de Schrödinger

En l'absence d'observation le vecteur d'état du système évolue de

façon causale* suivant la loi :
$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

où $H(t)$ est l'opérateur "Hamiltonien" du système.

Remarque :

* Cela veut dire que cette équation ne contient ni dérivée d'ordre supérieur à un par rapport au temps, ni intégrale de temps. Sinon, la donnée de $|\psi(t)\rangle$ seule ne serait plus suffisante pour décrire complètement l'état quantique du système. On serait alors en contradiction avec le postulat 1.

Oscillateur harmonique

Un oscillateur est un système périodique dans le temps. L'harmonicité indique que l'on considère le potentiel associé comme une parabole. Cette approximation est justifiée dans la plupart des cas, à condition que l'amplitude de l'oscillation ne soit pas trop élevée. C'est pour cela que le concept d'oscillateur harmonique joue un rôle majeur dans de nombreuses applications de la physique..

L'étude de l'oscillateur harmonique correspond donc à celle d'une fonction d'onde coincée dans un puits de potentiel parabolique. Ce qui est assimilable grosso modo aux atomes où les parois du puits de potentiel ne sont naturellement pas rectangulaires et infinies...

Dans le cas d'une particule libre en déplacement rectiligne, nous avons vu que l'énergie potentielle est nulle $E_{pot} = 0$ et l'équation de Schrödinger devient alors:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2 \cdot m \cdot E_{tot}}{\hbar^2} \cdot \Psi = 0 \quad (1)$$

Cependant pour une particule libre (en l'absence de champ de potentiel) l'énergie totale est donc égale à l'énergie cinétique :

$$E_{tot} = \frac{1}{2} m \cdot v^2 = \frac{p^2}{2 \cdot m} \quad (2)$$

Mais nous avons :

$$E_{tot} = h \cdot \nu = h \cdot \frac{\omega}{2\pi} = \hbar \cdot \omega = m \cdot c^2 \Leftrightarrow p = m \cdot c = \frac{E_{tot}}{c} = \frac{h \cdot \nu}{c} = h \cdot \lambda \quad (3)$$

Le rapport :

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (4)$$

étant la longueur d'onde associée de De Broglie. En introduisant le nombre d'onde $k = 2\pi/\lambda$, nous avons :

$$p = \hbar \cdot k \quad (5)$$

appelée "relation de De Broglie". Finalement :

$$E_{tot} = \frac{p^2}{2 \cdot m} = \frac{(\hbar \cdot k)^2}{2 \cdot m} \quad (6)$$

Dès lors, l'équation de Schrödinger peut s'écrire:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + k^2 \Psi = 0 \quad (7)$$

Nous voyons par substitution directe que cette équation différentielle admet pour solutions les fonctions d'onde:

$$\Psi_1(x) = Ae^{ikx} \text{ et } \Psi_2(x) = Be^{-ikx} \quad (8)$$

Ces deux différentes solutions représentent le déplacement d'une même particule une fois dans la direction $+x$ et l'autre dans $-x$.

Si $A = B = 1$ nous avons :

$$|\Psi(x)|^2 = \Psi^*(x) \cdot \Psi(x) = e^{-ikx} \cdot e^{ikx} = 1 \quad (9)$$

Le fait que ce résultat soit égal à l'unité, signifie que la probabilité de trouver la particule est la même en tout point. En d'autres termes, $\Psi(x) = e^{+ikx}$ décrit une situation dans laquelle l'incertitude sur la position est totale. Ce résultat est en accord avec le principe d'incertitude puisque $\Psi(x) = e^{+ikx}$ décrit une particule dont nous connaissons avec précision la quantité mouvement $p = \hbar \cdot k$; c'est-à-dire que $\Delta p = 0$, ce qui implique $\Delta x \rightarrow \infty$.

En analyse nous avons montré que la solution la plus générale d'une équation différentielle est la somme de ces solutions. Autrement dit dans notre exemple :

$$\Psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (10)$$

avec:

$$k = \frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot E_{tot}}}{\hbar} \quad (11)$$

Au fait, nous pouvons remarquer que si $E_{pot} \neq 0$ alors le résultat est le même à la différence que nous aurons :

$$k = \frac{\sqrt{2 \cdot m \cdot (E_{tot} - E_{pot})}}{\hbar} \quad (12)$$

Lorsque la particule qui nous intéresse se trouve dans un puits de potentiel décrit par la fonction (parabole):

$$E_{pot}(x) = \frac{1}{2} \cdot c \cdot x^2 \quad (13)$$

nous parlons alors "d'oscillateur harmonique".

Ce système est très important car l'Hamiltonien de l'équation intervient dans tous les problèmes mettant en jeu des oscillations telles que vibrations moléculaires et cristallines.

Prenons d'abord comme exemple l'oscillateur harmonique classique qui consiste en un corps assujéti à se déplacer le long d'un axe et soumis à une force de rappel proportionnelle à la distance à un point situé sur cet axe.

L'équation de ce corps est régie par l'équation de la dynamique:

$$m \cdot \frac{d^2 x}{dt^2} + k \cdot x = 0 \quad (14)$$

Nous avons vu en mécanique classique que la solution générale de cette équation est:

$$x = x_0 \cdot \cos(\omega \cdot t + \varphi) \quad (15)$$

avec comme pulsation:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (16)$$

L'énergie totale du système étant l'Hamiltonien classique nous écrivons :

$$H = E_{cin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m \cdot \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} k \cdot x(t)^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k \cdot x(t)^2 \quad (17)$$

Maintenant revenons à notre cadre quantique. De ce point de vue nous avons pour Hamiltonien (ou énergie totale):

$$H = E_{cin} + E_{pot} = \frac{p^2}{2m} + \frac{c^{te}}{2} \cdot x^2 \quad (18)$$

En utilisant ce que nous définissons comme une "écriture réduite", nous écrivons :

$$H = \frac{\hbar \cdot \omega_0}{2} (P^2 + Q^2) \quad (19)$$

où les opérateurs réduits sont :

$$P = \frac{p}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \quad \text{et} \quad Q = \sqrt{\frac{c^{te}}{\hbar \cdot \omega_0}} x \quad (20)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{c^{te}}{m}}$$

et où nous avons remplacé la constante par identiquement à l'oscillateur harmonique classique (cf. chapitre de Mécanique Classique).

Il est plus ou moins facile d'obtenir la relation de commutation:

$$[Q, P] = \sqrt{\frac{c^{te}}{m}} \frac{1}{\hbar \omega_0} [x, p] \quad (21)$$

Démonstration:

Rappelez-vous de la relation ci-dessous que nous avons vue lors de notre étude des opérateurs linéaires fonctionnels au début de ce chapitre :

$$p_x = \frac{1}{i} \hbar \frac{\partial}{\partial x}, p_y = \frac{1}{i} \hbar \frac{\partial}{\partial y}, p_z = \frac{1}{i} \hbar \frac{\partial}{\partial z} \quad (22)$$

Etudions les propriétés des commutateurs avec la quantité de mouvement. Nous avons démontré également plus haut la relation ci-dessous:

$$\frac{d}{dx} x = 1 + x \frac{d}{dx} \quad (23)$$

En multipliant cette dernière par \hbar/i , il vient:

$$\frac{\partial \hbar}{\partial x i} x = x \frac{\partial \hbar}{\partial x i} + 1 \frac{\hbar}{i} \quad (24)$$

que nous pouvons également écrire:

$$p_x \cdot x = x \cdot p_x - \hbar \cdot i \quad (25)$$

Si vous vous rappelez de la définition des commutateurs $([\alpha, \beta] = \alpha\beta - \beta\alpha)$, nous avons :

$$[x, p_x] = x \cdot p_x - p_x \cdot x = \hbar \cdot i \quad (26)$$

Nous avons donc pour notre oscillateur:

$$P = \frac{p}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} = \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \frac{\partial}{\partial x} i \hbar \quad \text{et} \quad Q = \sqrt{\frac{c^*}{\hbar \cdot \omega_0}} x \quad (27)$$

écrivons la définition le commutateur :

$$[Q, P] = QP - PQ \quad (28)$$

Donc:

$$\begin{aligned} [Q, P] &= \sqrt{\frac{c^*}{\hbar \cdot \omega_0}} \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \frac{\partial}{\partial x} i \hbar - \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \frac{\partial}{\partial x} i \hbar \cdot \sqrt{\frac{c^*}{\hbar \cdot \omega_0}} x \\ &= \sqrt{\frac{c^*}{\hbar \cdot \omega_0}} \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \cdot \left(x \cdot \frac{\partial}{\partial x} i \hbar - \frac{\partial}{\partial x} i \hbar \cdot x \right) = \sqrt{\frac{c^*}{m \cdot \omega_0}} \frac{1}{\hbar \cdot \omega_0} \cdot \left(x \cdot \frac{\partial}{\partial x} i \hbar - \frac{\partial}{\partial x} i \hbar \cdot x \right) \\ &= \sqrt{\frac{c^*}{m \cdot \omega_0}} \frac{1}{\hbar \cdot \omega_0} \cdot (x \cdot p_x - p_x \cdot x) = \sqrt{\frac{c^*}{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \cdot [x, p_x] = \omega_0 \frac{1}{\hbar \cdot \omega_0} \cdot [x, p_x] = \frac{1}{\hbar} [x, p_x] \end{aligned} \quad (29)$$

c'est ce qu'il fallait démontrer...

Nous avons maintenant intérêt pour résoudre l'équation différentielle d'utiliser les opérateurs non hermitiques a et a^\dagger définis (c'est une définition donc ne cherchez pas trop loin):

$$\begin{aligned} \sqrt{2}a &= Q + iP \\ \sqrt{2}a^\dagger &= Q - iP \end{aligned} \quad (30)$$

Ce qui nous définit donc les opérateurs (en posant temporairement $m = 1$):

$$a = \frac{Q + iP}{\sqrt{2}} = \frac{\omega x + ip}{\sqrt{2\hbar\omega_0}} \quad a^\dagger = \frac{Q - iP}{\sqrt{2}} = \frac{\omega x - ip}{\sqrt{2\hbar\omega_0}} \quad (31)$$

Nous retrouvons ces deux opérateurs très fréquemment en mécanique quantique et les physiciens parlent alors de "l'opérateur de destruction" a^\dagger et de "l'opérateur de création" a .

Compte tenu de la relation de commutation, nous vérifions :

$$2aa^\dagger = P^2 + Q^2 + 1 \quad \text{et} \quad 2a^\dagger a = P^2 + Q^2 - 1 \quad (32)$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} 2aa^\dagger &= (Q + iP)(Q - iP) = Q^2 + iPQ - iQP + P^2 \\ &= Q^2 - i[QP - PQ] + P^2 = Q^2 - i[Q, P] + P^2 \\ &= P^2 + Q^2 - i \cdot i = P^2 + Q^2 + 1 \end{aligned} \quad (33)$$

et :

$$\begin{aligned} 2a^\dagger a &= (Q - iP)(Q + iP) = Q^2 - iPQ + iQP + P^2 \\ &= Q^2 + i[QP - PQ] + P^2 = Q^2 + i[Q, P] + P^2 \\ &= P^2 + Q^2 + i \cdot i = P^2 + Q^2 - 1 \end{aligned} \quad (34)$$

et d'autre part:

$$[a, a^\dagger]_- = aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \quad (35)$$

Démonstration:

$$2aa^\dagger - 2a^\dagger a = (P^2 + Q^2) - (P^2 + Q^2) + 1 - (-1) = 2 \quad (36)$$

et donc en divisant par 2 des deux côtés de l'égalité nous avons :

$$aa^\dagger - a^\dagger a = 1 \quad (37)$$

Revenons à la relation:

$$H = \frac{\hbar \omega_0}{2} (P^2 + Q^2) \quad (38)$$

Utilisons :

$$a^\dagger a = \frac{P^2 + Q^2 - 1}{2} \Rightarrow \frac{P^2 + Q^2}{2} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2} \quad (39)$$

Donc:

$$H = \hbar \omega_0 \left(\frac{P^2 + Q^2}{2} \right) = \hbar \omega_0 \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (40)$$

Nous faisons maintenant l'hypothèse que Ψ est une fonction propre de N associée à la valeur propre n , telle que :

$$\begin{aligned} H\Psi &= E\Psi \\ \Rightarrow \hbar\omega_0 \left(N + \frac{1}{2} \right) \Psi_n &= \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) \Psi_n \\ \Rightarrow N\Psi_n &= n\Psi_n \end{aligned} \quad (41)$$

Cette hypothèse est très importante car nous allons nous en servir comme principe d'induction pour trouver toutes les fonctions propres à partir de celle de l'état fondamental $n=0$!

Etablissons maintenant des relations de commutation entre N et les opérateurs a ou a^\dagger . Pour cela multiplions d'abord $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ le tout par a^\dagger , nous obtenons:

$$Na^\dagger - a^\dagger N = a^\dagger \quad (42)$$

De même en multipliant $aa^\dagger - a^\dagger a = 1$ par a , nous obtenons:

$$aN - Na = a \quad (43)$$

Puisque selon notre hypothèse Ψ et n sont respectivement fonction et valeur propre de N , nous pouvons écrire:

$$N\Psi = n\Psi \quad (44)$$

Or, nous avons :

$$Na = aN - a \quad (45)$$

qui multipliée à droite par la fonction d'onde donne la relation :

$$Na\Psi = (n-1)a\Psi = na\Psi - a\Psi \quad (46)$$

Cette équation entraîne les conséquences suivantes:

- Ou bien $a\Psi = 0$ tel que $Na\Psi = na\Psi$

- Ou bien $a^\dagger\Psi$ est fonction propre de N pour la valeur propre $n-1$!!
Le même raisonnement établirait que $a^\dagger\Psi$ est fonction propre de N pour la valeur propre $n+1$, si elle n'est pas nulle (nous verrons plus loin que $a^\dagger\Psi$ n'est jamais nulle):

$$N(a^\dagger\Psi) = (n+1)a^\dagger\Psi \quad (47)$$

Cette relation est importante car si $a^\dagger\Psi$ n'est pas nulle pour une fonction propre donnée elle ne le sera pas non plus pour les autres fonctions propres de valeur propre $n+1$!!

Nous savons qu'il existe une valeur propre n_0 plus petite que toutes les autres correspondant au niveau fondamental (voir modèle de Bohr-Sommerfeld), cette valeur propre existe toujours.

Nécessairement, sa fonction propre Ψ_0 obéit à la relation :

$$a\Psi_0 = 0 \quad (48)$$

sinon quoi $n_0 - 1$ serait valeur propre et il y aurait contradiction.

En multipliant cette dernière relation par a^\dagger nous obtenons:

$$N\Psi_0 = 0 \quad (49)$$

ce qui montre que la valeur propre minimale n_0 est nulle. Nous connaissons donc le niveau fondamental de l'oscillateur:

$$E_0 = \hbar \omega_0 \left(n_0 + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \quad (50)$$

Remarque: Il faut noter que l'oscillateur n'est jamais dans un état de repos (mettre $n = 0$ dans l'expression de l'énergie plus haut) ce qui veut aussi dire que le zéro absolu ne peut pas être accessible puisque la température "chiffre" l'agitation atomique, or le repos n'existe pas! Pour obtenir la fonction propre correspondante, nous avons besoin de l'expression explicite de a . D'après:

$$P = \frac{p}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \quad \text{et} \quad Q = \sqrt{\frac{c^{te}}{\hbar \cdot \omega_0}} x \quad (51)$$

nous avons :

$$P = \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \frac{\hbar d}{i dx} \quad \text{et} \quad dQ = \sqrt{\frac{c^{te}}{\hbar \cdot \omega_0}} dx \Rightarrow \frac{1}{dx} = \sqrt{\frac{c^{te}}{\hbar \cdot \omega_0}} \frac{1}{dQ} \quad (52)$$

ce qui nous donne:

$$P = \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega_0}} \frac{\hbar}{i} \sqrt{\frac{c^{te}}{\hbar \cdot \omega_0}} \frac{d}{dQ} = \frac{1}{i} \frac{d}{dQ} \quad (53)$$

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{c^{te}}{m}}$$

car rappelons-le:

d'où:

$$\begin{aligned} \sqrt{2}a &= Q + \frac{d}{dQ} \\ \sqrt{2}a^\dagger &= Q - \frac{d}{dQ} \end{aligned} \quad (54)$$

Mais d'après $a \Psi_0 = 0$:

$$\left(Q + \frac{d}{dQ} \right) \Psi_0 = 0 \quad (55)$$

d'où:

$$\frac{1}{\Psi_0} \frac{d}{dQ} \Psi_0 = -Q \quad (56)$$

soit (résolution d'une simple équation différentielle):

$$\Psi_0(Q) = c^{te} e^{-Q^2/2} \quad (57)$$

Nous devons envisager, en réalité, Ψ_0 comme fonction de x par le biais de la coordonnée réduite Q .

D'après:

$$Q = \sqrt{\frac{c^{1/2}}{\hbar \cdot \omega_0}} x \quad (58)$$

en introduisant la longueur A :

$$x = A \cdot Q \Rightarrow dx = A \cdot dQ \quad (59)$$

avec :

$$A = \sqrt{\frac{\hbar \omega_0}{c^{1/2}}} \quad (60)$$

Nous allons fixer maintenant la constante en utilisant la condition de normalisation de la fonction d'onde ψ_0 :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi_0|^2 dx = 1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(c^{1/2} e^{-Q^2/2} \right)^2 A dQ = A |c^{1/2}|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Q^2} dQ = A |c^{1/2}|^2 \sqrt{\pi} \quad (61)$$

et donc :

$$1 = A |c^{1/2}|^2 \sqrt{\pi} \Rightarrow c^{1/2} = A^{-1/2} \pi^{-1/4} \quad (62)$$

Il est loisible de choisir la constante réelle et positive, nous avons finalement:

$$\Psi_0 = c^{1/2} e^{-Q^2/2} = A^{-1/2} \pi^{-1/4} e^{-Q^2/2} \quad (63)$$

Corollaire... : D'après ce que nous avons vu précédemment, en faisant agir a^\dagger sur Ψ_0 (explicitement nous faisons référence au

résultat $N(a^\dagger \Psi) = (n+1)a^\dagger \Psi$), nous obtenons les fonctions propres de N pour les valeurs propres entières 1, 2, etc. Nous vérifierons plus loin que nous épuisons ainsi toutes les valeurs propres de N .

Il reste à construire les autres fonctions propres et à les normer. En effet, si Ψ_n est fonction propre normée associée au niveau E_n , nous avons vu plus haut que $a^\dagger \Psi_n$ est fonction propre associée au niveau $n+1$, mais il n'y a pas de raison de la normer à nouveau puisqu'elle est justement associée à une fonction propre déjà normée.

Nous pouvons écrire:

$$a^\dagger \Psi_n = \alpha_n \Psi_{n+1} \quad (64)$$

α_n étant un coefficient à déterminer. Exprimons le fait que Ψ_{n+1} est déjà normée:

$$|\alpha_n|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{(a^\dagger \Psi_n)} \cdot (a^\dagger \Psi_n) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi_n} \cdot (a a^\dagger \Psi_n) dx \quad (65)$$

Soit en tenant compte de la relation $a\alpha^\dagger - \alpha^\dagger a = 1$ nous avons:

$$|\alpha_n|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi_n} [(1 + \alpha^\dagger a) \Psi_n] dx \quad (66)$$

Rappelons que $N(\alpha^\dagger \Psi) = (n+1)(\alpha^\dagger \Psi)$ donc:

$$|\alpha_n|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi_n} [(1 + \alpha^\dagger a) \Psi_n] dx = n+1 \quad (67)$$

Nous venons de vérifier au passage que $\alpha^\dagger \Psi$ n'est jamais nul (fait que nous avons supposé plus haut).

Toutes les fonctions Ψ_n (sauf Ψ_0 déjà fixée) ont un facteur de phase arbitraire (notion que nous avons vu lors de la définition des états liés et non liés), indépendamment les unes des autres,

l'argument de α_n reste donc à notre disposition et nous choisirons α_n réel positif. Cela fixe toutes les Ψ_n :

$$\alpha^\dagger \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1} \quad (68)$$

En itérant cette relation sur la fonction d'onde nous obtenons aisément (algèbre élémentaire):

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\alpha^\dagger)^n \Psi_0 \quad (69)$$

soit en tenant compte des relations suivantes (que nous avons déjà démontrées précédemment):

$$\sqrt{2}a = Q + \frac{d}{dQ}$$

$$\sqrt{2}a^\dagger = Q - \frac{d}{dQ} \quad \text{et} \quad \Psi_0 = A^{-1/2} \pi^{-1/4} e^{-Q^2/2} \quad (70)$$

Nous avons :

$$\Psi_n = \left(A \sqrt{\pi n!} 2^n \right)^{-1/2} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n e^{-Q^2/2} \quad (71)$$

Cette équation prend une forme plus simple, en s'appuyant sur la relation:

$$\left(Q - \frac{d}{dQ} \right) f(Q) = -e^{Q^2/2} \frac{d}{dQ} e^{-Q^2/2} f(Q) \quad (72)$$

Vérification:

$$\begin{aligned}
 -e^{\varrho^2/2} \frac{d}{dQ} e^{-\varrho^2/2} f(Q) &= -e^{\varrho^2/2} \left(-Q e^{-\varrho^2/2} f(Q) + e^{-\varrho^2/2} \frac{d}{dQ} f(Q) \right) \\
 &= -e^{\varrho^2/2} e^{-\varrho^2/2} \left(-Q f(Q) + \frac{d}{dQ} f(Q) \right) = \left(Q - \frac{d}{dQ} \right) f(Q)
 \end{aligned}
 \tag{73}$$

soit, en langage d'opérateurs:

$$Q - \frac{d}{dQ} = -e^{\varrho^2/2} \frac{d}{dQ} e^{-\varrho^2/2}
 \tag{74}$$

Ainsi:

$$\left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n = (-)^n e^{\varrho^2/2} \left(\frac{d}{dQ} \right)^n e^{-\varrho^2/2}
 \tag{75}$$

Nous obtenons ainsi l'expression de Ψ_n :

$$\Psi_n = (-)^n (A\sqrt{\pi}2^n)^{-1/2} e^{\varrho^2/2} \frac{d^n}{dQ^n} e^{-\varrho^2}
 \tag{76}$$

Par ailleurs, dans la théorie mathématique des familles de polynômes orthogonaux, nous rencontrons les "polynômes d'Hermite" H_n définis par:

$$H_n(Q) = (-)^n e^{\varrho^2} \frac{d^n}{dQ^n} e^{-\varrho^2}
 \tag{78}$$

Ce sont des polynômes de degrés n , pair ou impairs ($H_0 = 1, H_1 = 2Q, H_2 = 4Q^2 - 2$). En les employant, nous allégeons la relation précédente qui devient:

$$\Psi_n = (A\sqrt{\pi}2^n)^{-1/2} e^{-\varrho^2/2} H_n(Q)
 \tag{79}$$

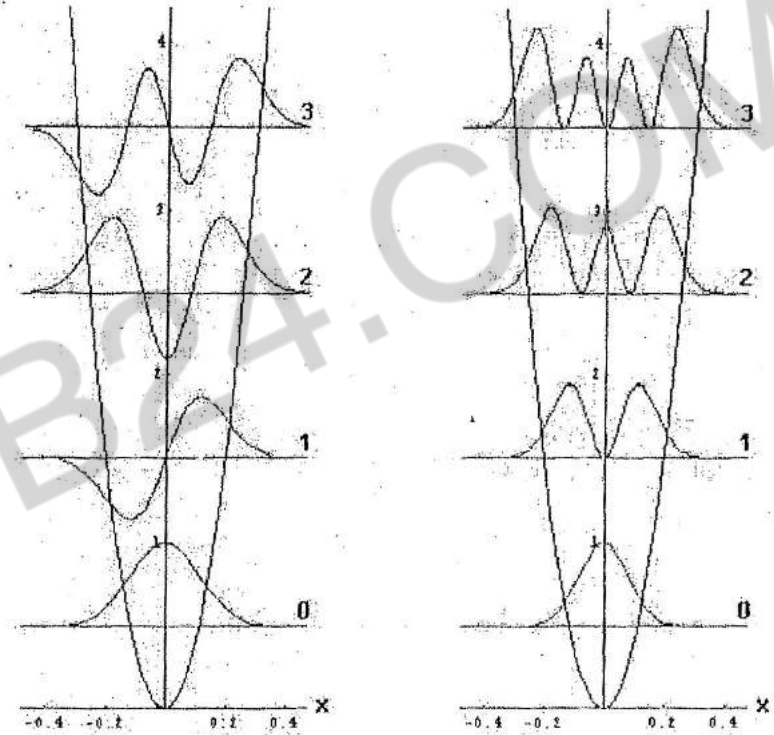
Ces polynômes constituent donc une base orthonormée de l'état quantique global et apparaissent donc naturellement dans l'expression générale des fonctions/états propres.

Finalement nous avons :

n	E_n	Ψ_n
0	$\frac{1}{2} \hbar \omega_0$	$\left(\frac{m\omega_0}{\hbar\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m^2 \omega_0^2 x^2}{\hbar^2 2} \right)$
1	$\frac{3}{2} \hbar \omega_0$	$\left(\frac{m\omega_0}{\hbar 2\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \frac{2m\omega_0}{\hbar} x \exp\left(-\frac{m^2 \omega_0^2 x^2}{\hbar^2 2} \right)$
2	$\frac{5}{2} \hbar \omega_0$	$\left(\frac{m\omega_0}{\hbar 8\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \left[4 \frac{m^2 \omega_0^2}{\hbar^2} x^2 - 2 \right] \exp\left(-\frac{m^2 \omega_0^2 x^2}{\hbar^2 2} \right)$
3	$\frac{7}{2} \hbar \omega_0$	$\left(\frac{m\omega_0}{\hbar 48\sqrt{\pi}} \right)^{1/2} \left[8 \frac{m^3 \omega_0^3}{\hbar^3} x^3 - 12 \frac{m^2 \omega_0^2}{\hbar^2} x \right] \exp\left(-\frac{m^2 \omega_0^2 x^2}{\hbar^2 2} \right)$

Tableau: 42.1- Fonctions et énergies propres de l'oscillateur harmonique pour $n=1..3$

Avec la non moins fameuse représentation graphique avec à gauche les fonctions propres associées Ψ_n et à droite la probabilité de présence :



(80)

En analysant ces fonctions d'ondes, nous retrouvons de nombreux résultats classiques : la particule dans le puits de potentiel a une probabilité de présence plus élargie si elle a une énergie plus haute (une bille au fond d'un puits va monter plus haut sur les bords si elle a plus d'énergie), la particule a plus de chance se retrouver sur ces

positions éloignées du centre du puits (la bille a une vitesse d'autant plus petite qu'elle est haut dans le puits : elle va donc passer beaucoup plus de temps en hauteur qu'au fond du puits).

Pour tous les calculs où des particules sont dans un puits de potentiel, l'approximation harmonique est très intéressante.

WWW.TALIB24.COM