Chapitre II

Description Quantique

Rappels

Ce que nous avons appris dans le chapitre précédent :

Tout système physique possède fondamentalement une dualité onde-corpuscule

L'aspect corpusculaire se manifeste au moment de la mesure

L'aspect ondulatoire se manifeste par la probabilité du résultat de la mesure

La relation de de Broglie fait le lien entre onde et corpuscule

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

$$h = 6,62606896.10^{-34} \ J.s$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054571628.10^{-34} \ J.s$$

La mesure perturbe le système

Principe d'incertitude (d'indétermination) de Heisenberg

$$\boxed{\Delta x \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta t \Delta E \gtrsim \frac{\hbar}{2} \qquad \Delta \theta \Delta J \gtrsim \frac{\hbar}{2}}$$

Premier Postulat : Fonction d'Onde

Un système physique possède des degrés de liberté : $\vec{q}$

L'aspect ondulatoire implique :

1er Postulat : A un instant t_0, un système physique est décrit par une ***fonction d'onde*** notée $\psi(\vec{q}, t_0)$ qui contient toute l'information sur ce système.

Toute fonction d'onde peut être décomposée en somme d'ondes planes :

$$\psi(\vec{q}, t) = \int \tilde{\psi}(\vec{k}) e^{-i(\omega_{\vec{k}} t - \vec{k}\cdot\vec{q})} d\vec{k} \qquad \psi(\vec{q}, t) = \int \tilde{\psi}(\vec{p}) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\vec{p}} t - \vec{p}\cdot\vec{q})} d\vec{p}$$

vecteur d'onde : $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$ associé au moment : $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

pulsation : ω associée à l'énergie : $E = \hbar\omega$

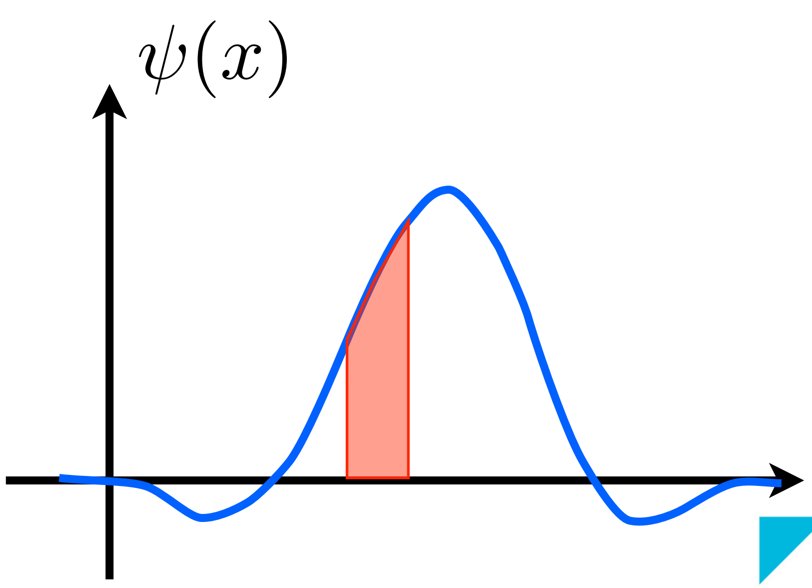
Probabilité de trouver le système dans une région de l'espace des configurations :

$$P(\Omega_{\vec{q}}) = \int_{\Omega_{\vec{q}}} |\psi(\vec{q}, t)|^2 d\vec{q}$$

Si la fonction d'onde est normée :

$$\int_{V_{\vec{q}}} |\psi(\vec{q}, t)|^2 d\vec{q} = 1 \qquad \Omega_{\vec{q}} \subset V_{\vec{q}}$$

avec $V_{\vec{q}}$ l'espace total accessible



IMT Atlantique

Deuxième Postulat : Observable

2$^{\text{ème}}$ *Postulat :* Toute grandeur physique mesurable $\mathcal{A}$ est décrite par un opérateur $\hat{A}$ agissant sur la fonction d'onde. Cet opérateur est appelé *observable*.

Exemples d'observables/opérateurs :

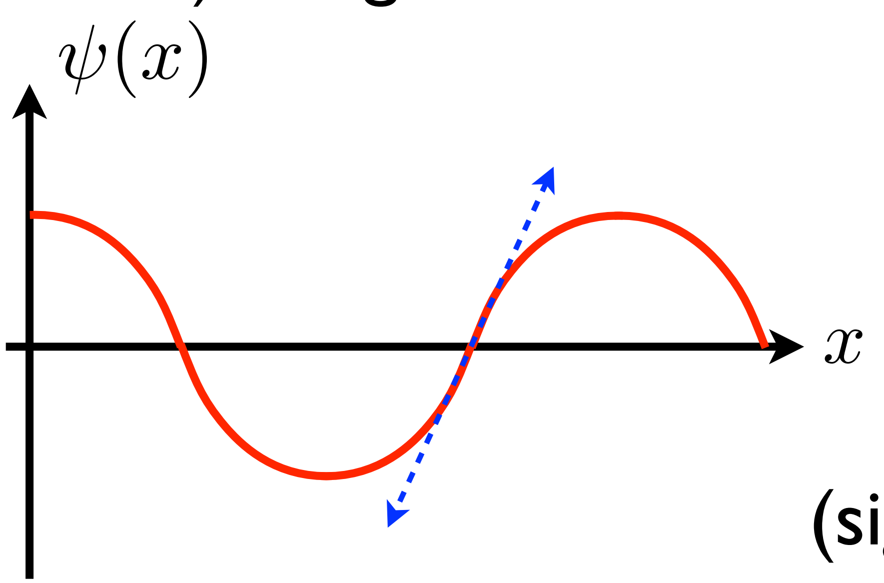
position : $\hat{X}\psi(x) = x\psi(x)$ impulsion : $\hat{P}\psi(x) = -i\hbar\dfrac{\partial\psi(x)}{\partial x}$

Explications de la forme de l'opérateur impulsion :

1) Ondes planes $\dfrac{\partial\psi_p(x)}{\partial x} = \dfrac{\partial e^{ipx/\hbar}}{\partial x} = -\dfrac{1}{i\hbar}p\psi_p(x)$

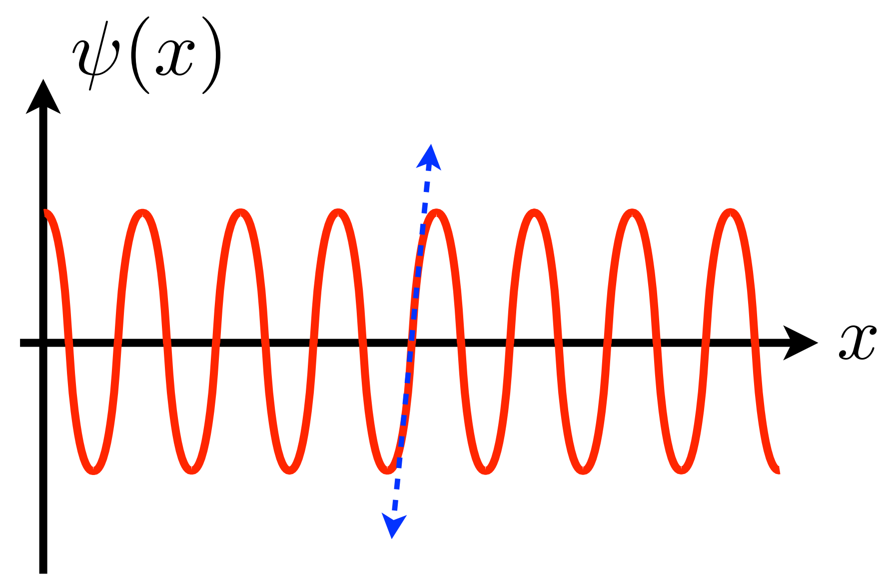
⇨ ondes planes : base propre de l'opérateur impulsion

2) Longueur d'onde



grande longueur d'onde
petite impulsion
petite dérivée

(signe négatif conventionnel)



IMT Atlantique

Principe d'incertitude : Il est impossible de mesurer simultanément deux grandeurs conjuguées. Ex : position et impulsion.

Fonction d'onde adaptée à la mesure de la position : $\psi(\vec{x},t)$

Fonction d'onde adaptée à la mesure de l'impulsion : $\tilde{\psi}(\vec{p},t)$

Lien entre représentations DDL et Moment : Transformée de Fourier

Raison : Décomposition en ondes planes.

$$\tilde{\psi}(\vec{p},t) = \int_{\vec{x}} \psi(\vec{x},t) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} d\vec{x} \quad \Leftrightarrow \quad \psi(\vec{x},t) = \int_{\vec{p}} \tilde{\psi}(\vec{p},t) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}} \frac{d\vec{p}}{\hbar}$$

Exemples :

Position parfaitement connue : $\psi(\vec{x},t) = \delta(\vec{x}-\vec{x}_0) \Leftrightarrow \tilde{\psi}(\vec{p},t) = 1$

Distribution gaussienne en position : $|\psi(x,t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}}$

$$\psi(x,t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma_x^2}} \Leftrightarrow \tilde{\psi}(p,t) = (2\pi\sigma_x^2)^{1/4} e^{-\sigma_x^2\frac{(p-p_0)^2}{\hbar^2}}$$

$\Rightarrow \sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_x}$ on retrouve le principe d'incertitude : $\Delta x \Delta p \gtrsim \frac{\hbar}{2}$

$|\psi(x)|^2$ correspond à une densité de probabilité.

⇨ possibilité de calculer des moyennes, des écart-types, etc.

Définition de la valeur moyenne de l'observable $\mathcal{A}$:

$$\boxed{\langle A \rangle = \int_{\vec{q}} \psi^*(\vec{q})\hat{A}\psi(\vec{q})d\vec{q}}$$

Exemples :

Position :

$$\langle X \rangle = \int_x \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_x x|\psi(x)|^2 dx$$

Impulsion :

$$\begin{aligned}\langle P \rangle &= \int_x \psi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right)dx = -i\hbar\int_x \psi^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\left(\int_p \psi(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp\right)dx \\ &= \int_x \psi^*(x)\left(\int_p p\tilde{\psi}(p)e^{\frac{i}{\hbar}px}dp\right)dx = \int_{p_1,p_2}\int_x \tilde{\psi}^*(p_2)p_1\tilde{\psi}(p_1)e^{\frac{i}{\hbar}(p_1-p_2)x}dx\,dp_1\,dp_2 \\ &= \int_p p|\tilde{\psi}(p)|^2 dp\end{aligned}$$

NB : $\int_x e^{i(k_1-k_2)x}dx = \delta(k_1-k_2)$

Valeurs moyennes correspondent aux grandeurs classiques/macroscopiques

(grand nombre de mesures)

IMT Atlantique

Espace des fonctions d'onde

Une fonction d'onde décrit l'état du système. Etat possible parmi une multitude.

La mesure donne un résultat qui correspond à un état propre de l'observable (Position, impulsion, spin, Energie) avec une certaine probabilité $|\psi(q)|^2$.

Attention : les variables peuvent être continues (position) ou discrètes (spin).

Nous pouvons considérer que le système est décrit dans un espace :

$$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n \to \mathbb{C}) \otimes \mathbb{C}^{m_0} \otimes \mathbb{C}^{m_1} \otimes \ldots$$

Degrés de liberté : continus et discrets

de dimension : n m_i

Les probabilités sont le module au carré des projections de la fonction d'onde sur une base de cet espace.

Espace des états = espace vectoriel muni d'un produit scalaire (espace de Hilbert).

Formalisme de Dirac (Bra-ket)

Soit un système avec des DDL continus ($\vec{q}$) et discrets dans l'ensemble $\{a_n\}$.
La fonction d'onde s'écrit comme un vecteur colonne appelé «ket» :

$$|\psi(\vec{q},t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{a_1}(\vec{q},t) \\ \psi_{a_2}(\vec{q},t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

exemple : $|\psi_{Ag}(t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{+\mu}(\vec{x},t) \\ \psi_{-\mu}(\vec{x},t) \end{pmatrix}$

Probabilité de mesurer a_i : $\int_{\vec{q}} |\psi_{a_i}(\vec{q},t)|^2 d\vec{q}$

Ket normé si : $\int_{\vec{q}} \sum_i |\psi_{a_i}(\vec{q},t)|^2 d\vec{q} = 1$

Vecteur ligne «bra» : $\langle\psi(\vec{q},t)| = \left(\psi^*_{a_1}(\vec{q},t), \quad \psi^*_{a_2}(\vec{q},t), \quad \ldots\right)$

tel que «bra-ket» vaut : $\langle\psi(\vec{q},t)|\psi(\vec{q},t)\rangle = \sum_i |\psi_{a_i}(\vec{q},t)|^2$

donc la norme vaut : $\sqrt{\int_{\vec{q}} \langle\psi(\vec{q},t)|\psi(\vec{q},t)\rangle d\vec{q}}$

Description d'une Quantité Quantifiée

L'opérateur $\hat{\mathcal{O}}$ d'une observable liée à une grandeur quantifiée peut s'exprimer sous la forme d'une matrice.
Exprimé dans sa base propre, $\hat{\mathcal{O}}$ est diagonal (valeurs propres $\{a_i\}$) :

$$\hat{\mathcal{O}} = \begin{pmatrix} a_0 & & \text{\Huge 0} \\ & a_1 & \\ \text{\Huge 0} & & \ddots \end{pmatrix}$$

Calcul de la valeur moyenne d'une observable (fonctions d'onde normées) :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle = \sum_{i,j} \psi_j^* \hat{\mathcal{O}}_{ij} \psi_i$$

Si les calculs sont effectués dans la base propre de l'observable, alors :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathcal{O}} | \psi \rangle = \sum_{i} a_i |\psi_i|^2$$

Probabilité d'obtenir la valeur propre a_i

Description d'une Quantité Quantifiée

Les opérateurs $\hat{\mathcal{O}}$ sont Hermitiens :

L'opérateur est son propre adjoint (le complexe conjugué de la transposée).

$$\hat{\mathcal{O}}^\dagger = \hat{\mathcal{O}}^{*T} = \hat{\mathcal{O}}$$

Démonstration :

$|\varphi\rangle = \hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle$ est un Ket dont le Bra vaut : $\langle\varphi| = \langle\psi|\hat{\mathcal{O}}^{*T} = \langle\psi|\hat{\mathcal{O}}^\dagger$

Donc la valeur moyenne (un réel) vaut :

$$\begin{aligned}\langle\psi|\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle &= \langle\psi|\left(\hat{\mathcal{O}}|\psi\rangle\right) = \langle\psi|\varphi\rangle \\ &= \left(\langle\varphi|\psi\rangle\right)^* = \langle\varphi|\psi\rangle \\ &= \left(\langle\psi|\hat{\mathcal{O}}^{*T}\right)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\mathcal{O}}^\dagger|\psi\rangle\end{aligned}$$

CQFD !

IMT Atlantique

Les Commutateurs

En algèbre linéaire, l'ordre d'application des matrices importe.
Qu'en est-il avec les opérateurs ?

Exemple :

$$\hat{x}\hat{p}_x|\psi\rangle = -i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}|\psi\rangle$$

$$\hat{p}_x\hat{x}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(x|\psi\rangle\right) = -i\hbar|\psi\rangle - i\hbar x\frac{\partial}{\partial x}|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{p}_x\hat{x}|\psi\rangle \neq \hat{x}\hat{p}_x|\psi\rangle$$

Introduction d'un nouvel opérateur : le Commutateur

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Différence de résultat suivant l'ordre de mesure des observables :
« mesure de B puis de A moins mesure de A puis de B »
Appliqué à la mesure de position et d'impulsion : $[\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$
mais $[\hat{y},\hat{p}_x] = 0$ et $[\hat{z},\hat{p}_x] = 0$

Propriétés:

$$\left[\hat{B},\hat{A}\right] = -\left[\hat{A},\hat{B}\right] \qquad \left[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\right] + \left[\hat{A},\hat{C}\right] \qquad \left[\hat{A},\hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A},\hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A},\hat{C}\right]$$

ECOC

Si l'ordre de mesure d'observables importe, il doit existe un ensemble d'observables qui permet de connaître complètement l'état d'un système sans affecter les résultats des mesures précédentes.

Les opérateurs associés à cet ensemble d'observables doivent alors tous commuter entre eux.

Cet ensemble constitue un **ECOC** (Ensemble Complet d'Opérateurs qui Commutent).

Ex: particule sans spin sans interaction: $\left\{\hat{X},\hat{Y},\hat{Z}\right\}$ ou $\left\{\hat{X},\hat{P}_y,\hat{Z}\right\}$ ou $\left\{\hat{P}_x,\hat{P}_y,\hat{P}_z\right\}$

Atome d'hydrogène (sans structure fine):

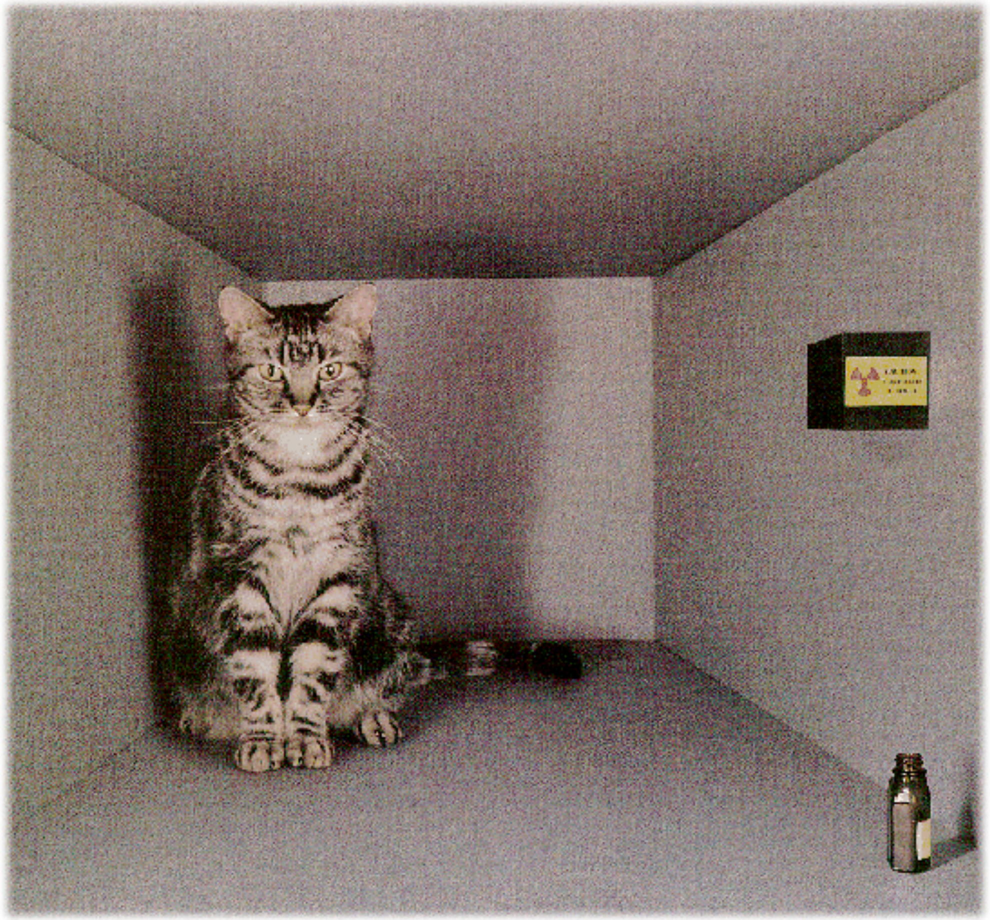
Etat défini par l'énergie (nombre principal *n*), le moment cinétique (nombre secondaire *l*) et l'orientation de ce moment suivant une direction (nombre magnétique *m*).

⇨ ECOC : $\left\{\hat{H},\hat{L}^2,\hat{L}_z\right\}$ avec les états propres $\left|n,l,m\right\rangle$

IMT Atlantique

Superposition d'états : Chat de Schrödinger

Paradoxe créé par Schrödinger pour essayer de mettre à mal
la mécanique quantique



J'ai jamais tué de chats…
… ou alors y a longtemps

Un chat est placé dans une boîte opaque avec un système létal déclenché par la désintégration d'un atome radioactif de durée de vie τ.

L'état Vivant/Mort du chat est décrit par la fonction d'onde :

$$\psi_{Chat}(0) = \psi_V$$
$$\psi_{Chat}(t) = e^{-t/2\tau}\psi_V + \sqrt{1 - e^{-t/\tau}}\psi_M$$

⇨ Le chat est «à la fois» mort et vivant
l'ouverture de la boîte (mesure) permet
de fixer l'état du chat (réduction de la F-O).

Paradoxe levé grâce à la **décohérence** : Chat = nombre N_a d'atomes qui mesurent constamment l'état de leurs voisins.

⇨ la fonction d'onde du chat est réduite quasi instantanément.

IMT Atlantique

Chapitre II : choses à retenir

Superposition d'états :

Chaque état peut être considéré comme une superposition d'autres états

ex : Transformée de Fourier : représentation x ou représentation p

$$\psi(\vec{x}, t) \leftrightarrow \tilde{\psi}(\vec{p}, t)$$

Les Postulats de la Physique Quantique :

- Opérateur : Objet mathématique lié à une observable agissant sur la F.-O.
- Signification des composantes de la fonction d'onde :

Probabilité de mesure $P(\Omega_{\vec{q}}) = \int_{\Omega_{\vec{q}}} |\psi(\vec{q}, t)|^2 d\vec{q}$

(si la F.-O. est normée)

- Résultat d'une mesure : parmi les valeurs possibles de l'opérateur associé

Le Formalisme de Dirac (bra-ket):

La mesure perturbe le système ⇨ modification de la F.-O.