

Séance III

Postulats de la Physique Quantique

Gines MARTINEZ
Chercheur CNRS

Séance III

Cours Magistral

Gines MARTINEZ
Chercheur CNRS

Rappels

Ce que nous avons appris précédemment :

Tout système physique possède fondamentalement un comportement ondulatoire

L'aspect corpusculaire se manifeste au moment de la mesure

La relation de de Broglie fait le lien entre onde et l'impulsion du corpuscule

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

$$h = 6,62606896 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,054571628 \cdot 10^{-34} \text{ J.s}$$

La mesure perturbe le système

Principe d'incertitude (d'indétermination) de Heisenberg

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

Premier Postulat : Fonction d'Onde

L'aspect ondulatoire implique :

1^{er} Postulat : A un instant t_0 , un système physique est décrit par la donnée d'un ket $|\psi(t_0)\rangle$ appartenant à l'espace de états \mathcal{E} .

\mathcal{E} es un espace vectoriel, dimension discrète ou continue (espace de Hilbert)
Une propriété fondamentale est le principe de superposition (linéarité)
 $\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, est un ket. Il existe un produit scalaire euclidien
 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \in \mathbb{C}$

Un ket peut être exprime en fonction des ses coefficients sur une base orthonormale. Par exemple la base de l'espace de positions $|x\rangle$ avec
 $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$:

$$|\psi\rangle = \int_{\Omega} \psi(x) |x\rangle dx \text{ avec } \psi(x) = \langle\psi|x\rangle$$

La probabilité de trouver le système dans une région de l'espace est

$$P(\Omega) = \int_{\Omega} |\langle\psi|\psi\rangle|^2 dx = \int_{\Omega} |\psi(x)|^2 dx$$

Probability density :

$$\rho(x) = |\langle\psi|\psi\rangle|^2 = \psi^*(x)\psi(x)$$

D'autres bases sont possibles

Une autre base pourrait être la base des impulsions (ondes planes) $|p\rangle$ avec

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-i\frac{px}{\hbar}} |x\rangle dx \text{ et donc } \langle p | p' \rangle = \delta(p - p') \text{ et}$$

Relation de
De Broglie

$$\phi_p(x) = \langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \text{ (onde plane en une dimension)}$$

Du coup, pour un état du système $|\psi\rangle$ avec des coefficients $\psi(x)$ dans l'espace des positions, les coefficients dans l'espace des impulsions sera

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

et inversement

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

Densité de probabilité dans
l'espace des impulsions:

$$\tilde{\rho}(p) = |\langle \psi | \psi \rangle|^2 = \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p)$$

Valable pour tout paramètre q
lié à une base orthonormale

Deuxième Postulat : Observable

2^{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 : $\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$

1) Ondes planes $\hat{P}\phi_p(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\right) = p\phi_p(x)$

⇒ ondes planes : base propre de l'opérateur impulsion

2) Observables des grandeurs physiques

⇒ valeur propres existent et sont réelles

⇒ opérateur Hermitien $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}$: diagonalisable, valeurs propres réelles et sous-espace propres orthogonaux

⇒ Les vecteur propres forment une basse, et il existe une transformation unitaire U pour rendre \hat{Q} diagonale

Observable Energie cinétique

Par analogie avec la physique classique, l'observable énergies cinétique \hat{K} est définie comme :

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \text{ et du coup les ondes planes}$$

sont également propres :

$$\hat{K}\phi_p(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\phi_p(x) = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi_p(x)}{\partial x^2} = \frac{p^2}{2m}$$

Principe d'incertitude (d'intermination)

$$[\hat{P}, \hat{x}]\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial x\psi(x)}{\partial x} + i\hbar x \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -i\hbar\psi(x)$$

$$[\hat{P}, \hat{X}] = -i\hbar$$

Les bases orthonormales associées sont «différentes». Nous ne pouvons pas connaître pour un état $|\psi\rangle$ avec précision infinie la position et l'impulsion

Exemple numérique avec la gaussienne $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}} e^{-ip_0x/\hbar}$$

$$\tilde{\psi}(p) = (\sigma_x^2/(2\pi\hbar^2))^{1/4} e^{-\sigma_x^2 \frac{(p-p_0)^2}{\hbar^2}} \text{ donc } \sigma_p = \frac{\hbar}{2\sigma_x}, \sigma_p \times \sigma_x = \frac{\hbar}{2}$$

Démonstration du principe d'indétermination

Grandeurs physiques $\hat{X}^\dagger = \hat{X}$ $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$ $[\hat{P}, \hat{X}] = -i\hbar$

$|\psi\rangle$ Par simplicité $\langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle = 0$ $\langle\psi|\hat{P}|\psi\rangle = 0$

$|\phi\rangle = (\hat{P} + i\lambda\hat{X})|\psi\rangle$ $\lambda \in \mathbb{R}$ $\langle\phi|\phi\rangle \geq 0$

$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|(\hat{P} - i\lambda\hat{X})(\hat{P} + i\lambda\hat{X})|\psi\rangle \geq 0$

$\langle\psi|(\hat{P}^2 + i\lambda\hat{P}\hat{X} - i\lambda\hat{X}\hat{P} + \lambda^2\hat{X}^2)|\psi\rangle \geq 0$

$\langle\psi|(\hat{P}^2 + i\lambda[\hat{P}, \hat{X}] + \lambda^2\hat{X}^2)|\psi\rangle \geq 0$

$\langle\psi|\hat{P}^2|\psi\rangle + \lambda\hbar + \lambda^2\langle\psi|\hat{X}^2|\psi\rangle \geq 0$

$\Delta P^2 + \lambda\hbar + \lambda^2\Delta X^2 \geq 0$

$$\Delta P^2 \times \Delta X^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Mesure des grandeurs physiques

3^{ème} Postulat : A chaque mesure d'une grandeur physique Q associée un opérateur \hat{Q} la valeur mesurée doit être une valeur propre q

4^{ème} Postulat : Lors de la mesure d'une grandeur physique Q la probabilité de mesurer une valeur propre q avec une densité de probabilité $d\mathcal{P} = |\psi(q)|^2 dq$

$$\hat{Q}|q\rangle = q|q\rangle$$

Si $\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger$, q est réel et les vecteur propres sont orthogonaux

Valeurs moyennes

La valeur moyenne de une serie de mesures de la grandeur physique Q sur le même état quantique $|\psi\rangle$ sera :

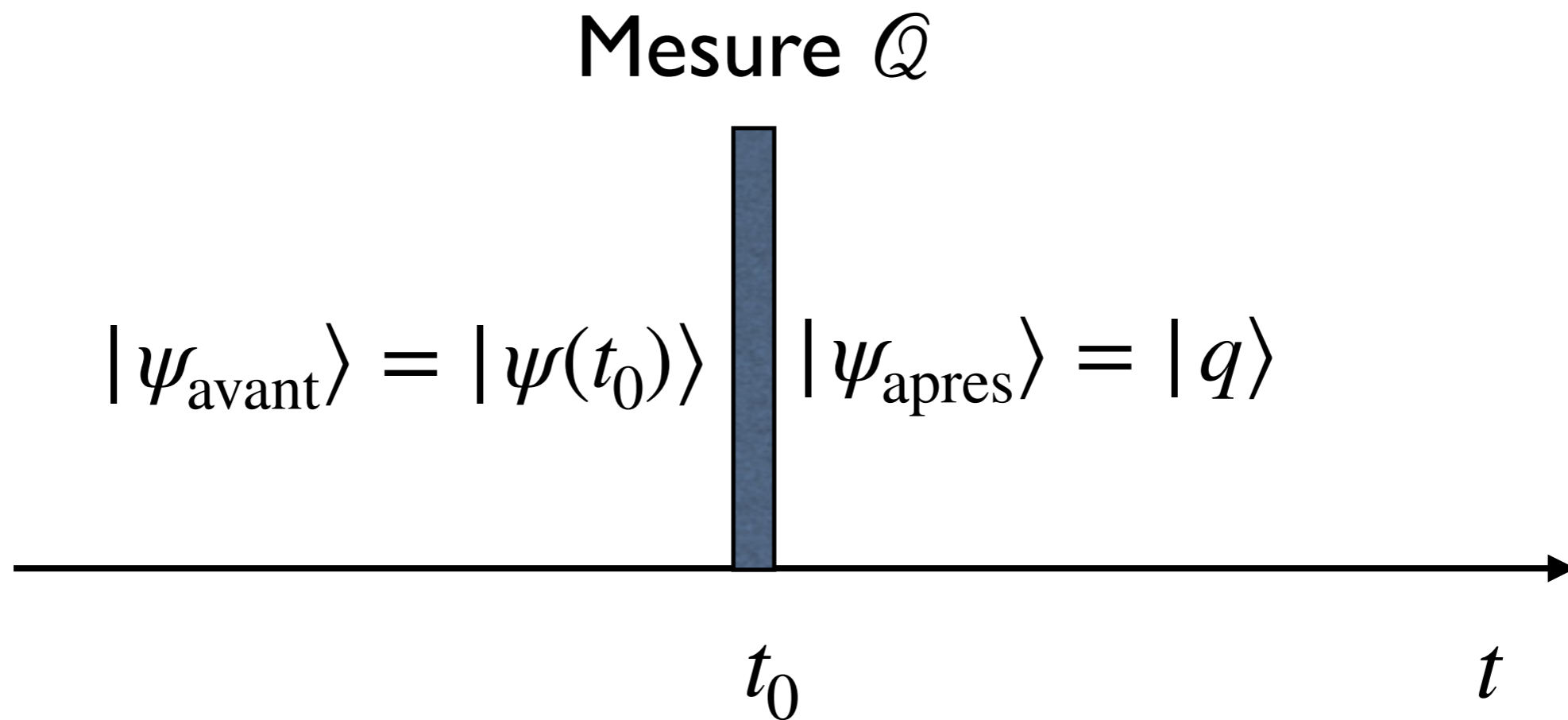
$$\langle Q \rangle = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \left(\int \psi^*(q) dq \langle q | \right) \hat{Q} \left(\int \psi(q') dq' | q' \rangle \right) =$$

$$\left(\int \psi^*(q) dq \langle q | \right) \left(\int q \psi(q') dq' | q' \rangle \right) = \iint q \psi^*(q) \psi(q') \langle q | q' \rangle dq dq' =$$

$$\int q |\psi(q)|^2 dq$$

5ème Postulat : réduction de la fonction d'onde

5ème Postulat : Si la mesure d'une grandeur physique Q est q sur l'état $|\psi\rangle$, l'état ket du système après la mesure devient $|q\rangle$, ou dans le cas des états dégénérés, l'état ket du système après la mesure devient la projection de $|\psi\rangle$ sur le sous-espace propre associé à q



Hamiltonien d'une particule de masse m
dans un potentiel scalaire

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{V}(x)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$$

Evolution du système avec le temps

6^{ème} Postulat : L'évolution dans le temps d'un état $|\psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger :

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

où $\hat{H}(t)$ est l'opérateur Hamiltonien (grandeur physique énergie totale du système)

Pour les états propres de opérateur \hat{H} indépendant du temps :

$\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle$ l'évolution temporelle devienne

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

et du coup

$$|\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)} |\psi_E(t_0)\rangle$$

Il s'agit d'un état stationnaire donc la probabilité

$$|\psi_E(x, t)|^2 = |\psi_E(x, t_0)|^2$$

Phase globale arbitraire $e^{i\phi}$

Equation de Schrödinger indépendant du temps $\hat{H} |\psi_E\rangle = E |\psi_E\rangle$

Conservation des grandeurs physiques

L'énergie total du système est $\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle$

$$\frac{d\langle \hat{H} \rangle}{dt} = \frac{d\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle}{dt} = \frac{d\langle \psi(t) |}{dt} \hat{H} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \hat{H} \frac{d | \psi(t) \rangle}{dt} =$$

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

Si l'opérateur \hat{Q} commute avec \hat{H} $[\hat{H}, \hat{Q}] = 0$

alors la grandeur physique Q est conservée

$$\text{Autrement } \frac{d\langle \hat{Q} \rangle(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{Q}, \hat{H}] \rangle$$

Solution à l'équation de Schrödinger

Etat du système à t_0 $|\psi(t_0)\rangle$
 $|\psi(t)\rangle$?

Equation de Schrödinger indépendant du temps $\hat{H}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_E(t)\rangle = \hat{H} |\psi_E(t)\rangle = E |\psi_E(t)\rangle \longrightarrow |\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\psi_E(t_0)\rangle$$

Décomposition spectrale à t_0

$$|\psi(t_0)\rangle = \int \tilde{\psi}(E) |\psi_E\rangle dE$$

$$|\psi(t)\rangle = \int \tilde{\psi}(E) e^{-\frac{i}{\hbar} E(t-t_0)} |\psi_E\rangle dE$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_E | \psi(t_0) \rangle &= \int \tilde{\psi}(E') \langle \psi_E | \psi_{E'} \rangle dE' = \\ &= \int \tilde{\psi}(E') \delta(E - E') dE' = \tilde{\psi}(E) \end{aligned}$$

Propagation d'un quanton libre

Quanton libre ($V(x)=0$) mesuré à $t=0$ à la position x_0 avec une impulsion p_0 :

Probabilité de présence (ID avec incertitude de la mesure : σ_x)

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_x^2}} \Rightarrow |\tilde{\psi}(p, 0)|^2 = \sqrt{\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}} e^{-\frac{2\sigma_x^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}}$$

Equation de Schrödinger :

$$\tilde{\psi}(p, t) = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{\sigma_x^2(p-p_0)^2}{\hbar^2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t}$$

Propagation du quanton :

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{e^{-\frac{\left(x-x_0 - \frac{p_0}{m}t\right)^2}{2\sigma_x^2 \left(1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_x^2}\right)^2\right)}}}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2 \left(1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_x^2}\right)^2\right)}}$$

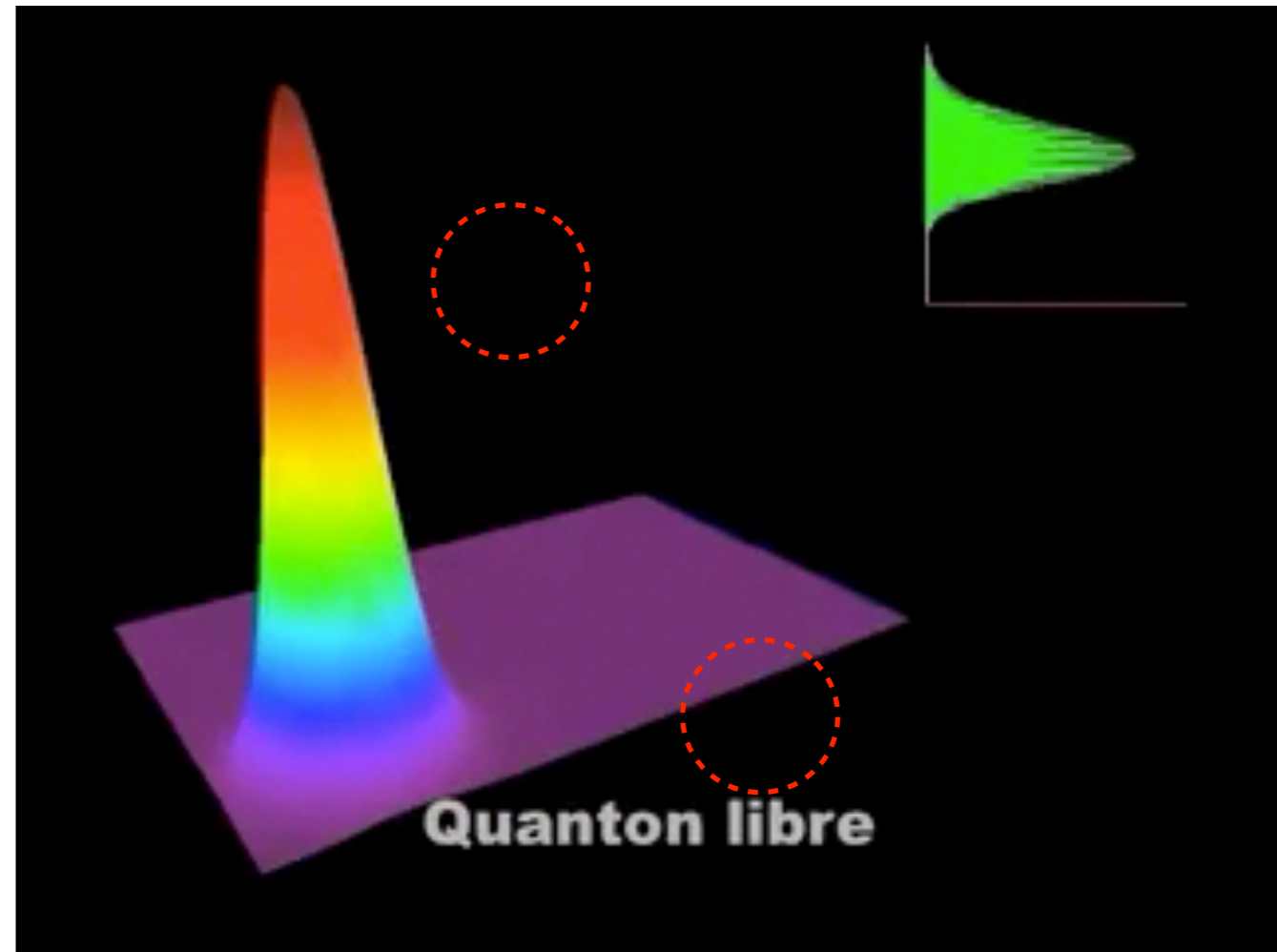
Déplacement moyen classique :

$$\langle x(t) \rangle = x_0 + \frac{p_0}{m} t \quad \left(v_g = \frac{p_0}{m}\right)$$

Elargissement de la F.-O. :

$$\sigma_x(t) = \sigma_x \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_x^2}\right)^2}$$

Raison : incertitude sur la vitesse



Si l'énergie est discrète

Etat du système à t_0 $|\psi(t_0)\rangle$
 $|\psi(t)\rangle$?

Equation de Schrödinger indépendant du temps $\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_n(t)\rangle = \hat{H} |\psi_n(t)\rangle = E_n |\psi_n(t)\rangle \longrightarrow |\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |\psi_n(t_0)\rangle$$

Décomposition spectrale à t_0

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n=0}^{n \rightarrow \infty} c_n |\psi_n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{n \rightarrow \infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |\psi_n\rangle$$

$$\langle \psi_n | \psi(t_0) \rangle = \sum_{m=0}^{m \rightarrow \infty} c_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \sum_{m=0}^{m \rightarrow \infty} c_m \delta_{nm} = c_n$$

Connexion avec la physique classique

Quantique

Classique

$$|\psi(t)\rangle$$

Grandeurs Physiques

$$\mathcal{X}, \mathcal{P}, \mathcal{L}, \mathcal{H}, \dots$$

$$\hat{X}, \hat{P}, \dots$$

$$\langle \hat{X}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{X} | \psi(t) \rangle \longrightarrow x(t)$$

$$\langle \hat{P}(t) \rangle = \langle \psi(t) | \hat{P} | \psi(t) \rangle \longrightarrow v(t)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(x)$$

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

$$m \frac{dv(t)}{dt} = F = - \frac{dV(x)}{dx}$$

Théorème d'Ehrenfest

$$\frac{d\langle\hat{X}\rangle(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{X}, \hat{H}]\rangle$$

$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{P}, \hat{H}]\rangle$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(x)$$

$$[\hat{X}, \hat{H}] = [\hat{X}, \hat{P}^2]/(2m) = \frac{i\hbar}{m}\hat{P}^2$$

$$[\hat{P}, \hat{H}] = [\hat{P}, V(\hat{X})] = -\frac{d\hat{V}(\hat{X})}{d\hat{X}}$$



$$\frac{d\langle\hat{X}\rangle(t)}{dt} = \langle\hat{P}\rangle/m$$



$$\frac{d\langle\hat{P}\rangle(t)}{dt} = -\frac{d\hat{V}(\hat{X})}{d\hat{X}}$$

Lois de Newton!

Transformation unitaire

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger \quad \hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \mathbb{1}$$

$$|\tilde{\psi}_1\rangle = \hat{U}|\psi_1\rangle \quad |\tilde{\psi}_2\rangle = \hat{U}|\psi_2\rangle$$

$$\langle \tilde{\psi}_1 | \tilde{\psi}_2 \rangle = \langle \tilde{\psi}_1 | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \tilde{\psi}_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$

Si \hat{A} opérateur hermitique alors

$$\hat{T} = e^{i\hat{A}} = 1 + i\hat{A} + \dots \text{ est unitaire}$$
$$\hat{T}^\dagger \hat{T} = e^{-i\hat{A}^\dagger} e^{+i\hat{A}} = e^{-i\hat{A}} e^{+i\hat{A}} = \mathbb{1}, \text{ car}$$
$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0$$

$$\sum_{k=1}^{k=n} U_{ki}^* U_{kj} = \delta_{ij}$$

Conservation du produit scalaire et de la norme. Transformation entre bases orthonormées

Si \hat{U} et \hat{V} unitaires, $\hat{U}\hat{V}$ est unitaire

En 3D et nombre réels, les transformations orthogonales sont de transformations unitaire (rotation, parité, ...)

Dans une nouvelle base l'opérateur \hat{Q} s'exprime comme $\hat{U}\hat{Q}\hat{U}^\dagger$

$$j(x) = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\langle \psi^*(t) \frac{d\psi(x, t)}{dx} - \psi(x, t) \frac{d\psi^*(x, t)}{dx} \right)$$

Solution équation de Schrödinger

Une autre façon de voir la solution de l'équation de Schrödinger

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

Opérateur unitaire évolution temporelle

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\Psi(t_0)\rangle$$

$$|\psi(t_0 + \Delta t)\rangle \approx |\psi(t_0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t |\psi(t_0)\rangle$$

Séance III

Travaux Dirigés

Gines MARTINEZ
Chercheur CNRS

TDI : Particule quantique en repos

Si repos veut dire l'état $|p\rangle$ avec $p=0$ état avec une probabilité spatiale par tout dans l'espace

$$\phi_p(x) = \langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

Dans un espace limité (par exemple $x \in [-a/2, a/2]$) l'état $p=0$ n'existe pas (voir le puit carré infini)

Si repos veut dire $\langle \hat{P} \rangle = \langle \psi | \hat{P} | \psi \rangle = 0$
alors une multitude de états du système sont des états en repos

Supposons des états avec une distribution spatiale gaussienne et
particule libre ($\hat{V}(\hat{X}) = \hat{0}$).

Particule en repos gaussienne

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} \longrightarrow \psi(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\sigma^2}}$$

$$\tilde{\psi}(p) = \left(\frac{4\sigma_x^2}{2\pi\hbar^2} \right)^{1/4} e^{-\sigma_x^2 \frac{p^2}{\hbar^2}}$$

$$\langle \hat{P} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) dp = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} p e^{-2\sigma_x^2 p^2 / \hbar^2} dp = 0$$

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) dp = \left(\frac{2\sigma_x^2}{\pi\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p^2}{2m} e^{-2\sigma_x^2 p^2 / \hbar^2} dp = \frac{\hbar^2}{4m\sigma_x^2}$$

$$\langle \hat{P} \rangle = 0, \text{ et } \langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2}{4m\sigma_x^2} \neq 0 \text{ !!!!}$$

Balle de tennis
Atomes d'un gas
Atomes froids
Electrons dans un metal
Electrons dans l'atome
Nucléons dans un noyau
Quarks dans un proton

TD2 : Particule dans un puit carré infini

Le puits carré infini

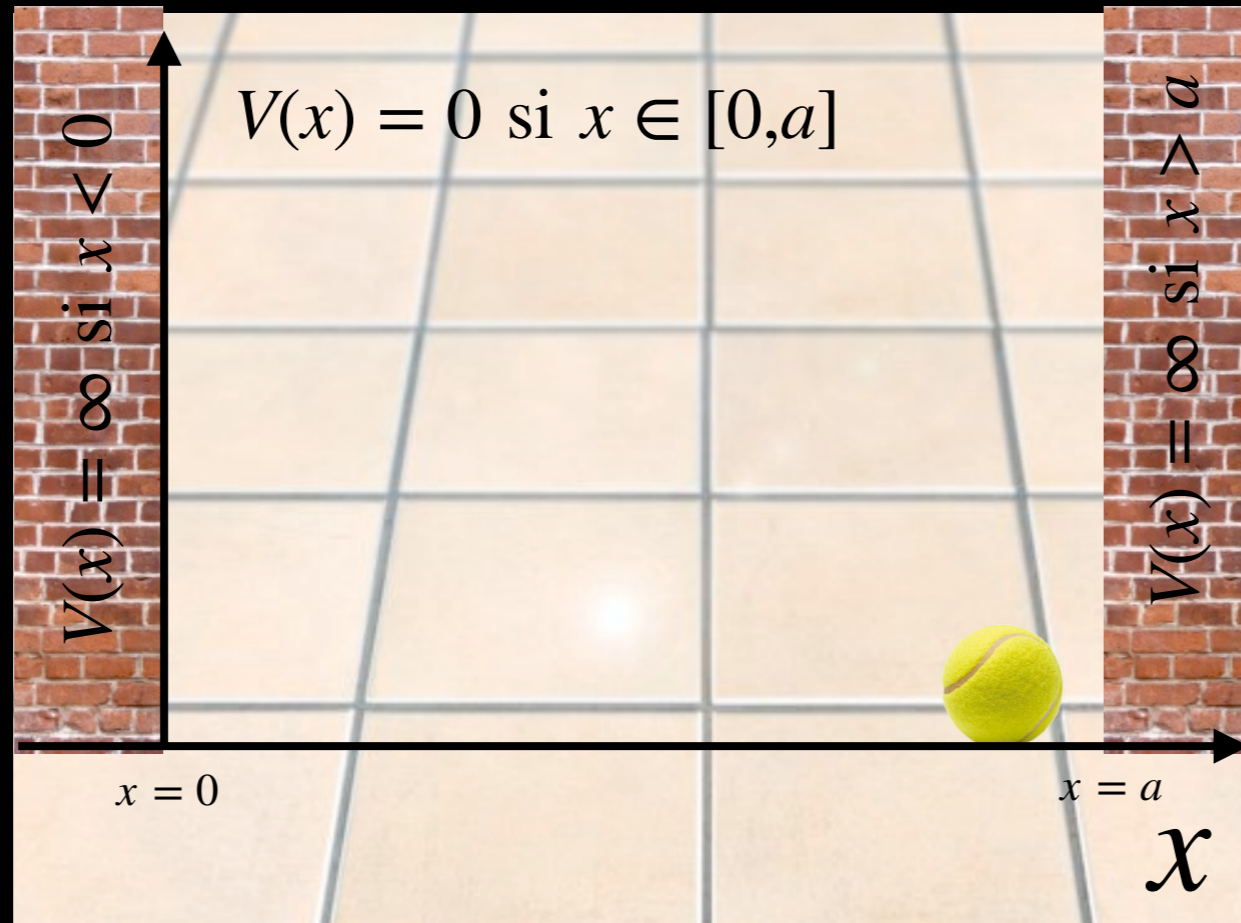
La balle de tennis entre deux murs

$$\psi_E(x < 0) = 0$$

$$\psi_E(x > a) = 0$$

$$\frac{\psi_E(x < 0)}{dx} = 0$$

$$\frac{\psi_E(x > a)}{dx} = 0$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = E\psi_E(x) \text{ dans } 0 \leq x \leq a$$



Projet
intéressant :
PONG
quantique

Etats stationnaires du puits carré infini

Les conditions de contours vont provoquer la quantification de l'énergie

L'énergie ne peut pas être nulle. Il y a une énergie minimale

Donc une impulsion minimale

Dans un état stationnaire, la particule est un peu partout dans le puits!

Normalisation : $\int_{x=0}^{x=a} |\psi_E(x)|^2 dx = 1 \longrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_E(x)}{dx^2} = E\psi_E(x) \text{ dans } 0 \leq x \leq L$$

$$\psi_E(x) = A \sin\left(\frac{\sqrt{2mEx}}{\hbar}\right) + B \cos\left(\frac{\sqrt{2mEx}}{\hbar}\right)$$

$$\psi_E(0) = 0 \rightarrow B = 0$$

$$\psi_E(a) = 0 \rightarrow \frac{\sqrt{2mEa}}{\hbar} = n\pi$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 = \frac{h^2}{8ma^2} n^2 \quad p_n = \frac{\pi \hbar}{a} n = \frac{h}{2a} n$$



Etats propres du puit carré infini $\psi_{100}(x)$, $10000E_0$, $100p_0$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$E_n = \frac{h^2}{8ma^2} n^2 = n^2 E_0$$

$$p_n = \frac{h}{2a} n = np_0$$

L'équation de Schrödinger indépendante du temps a été résolue.

$$\psi_6(x), 36E_0, 6p_0$$

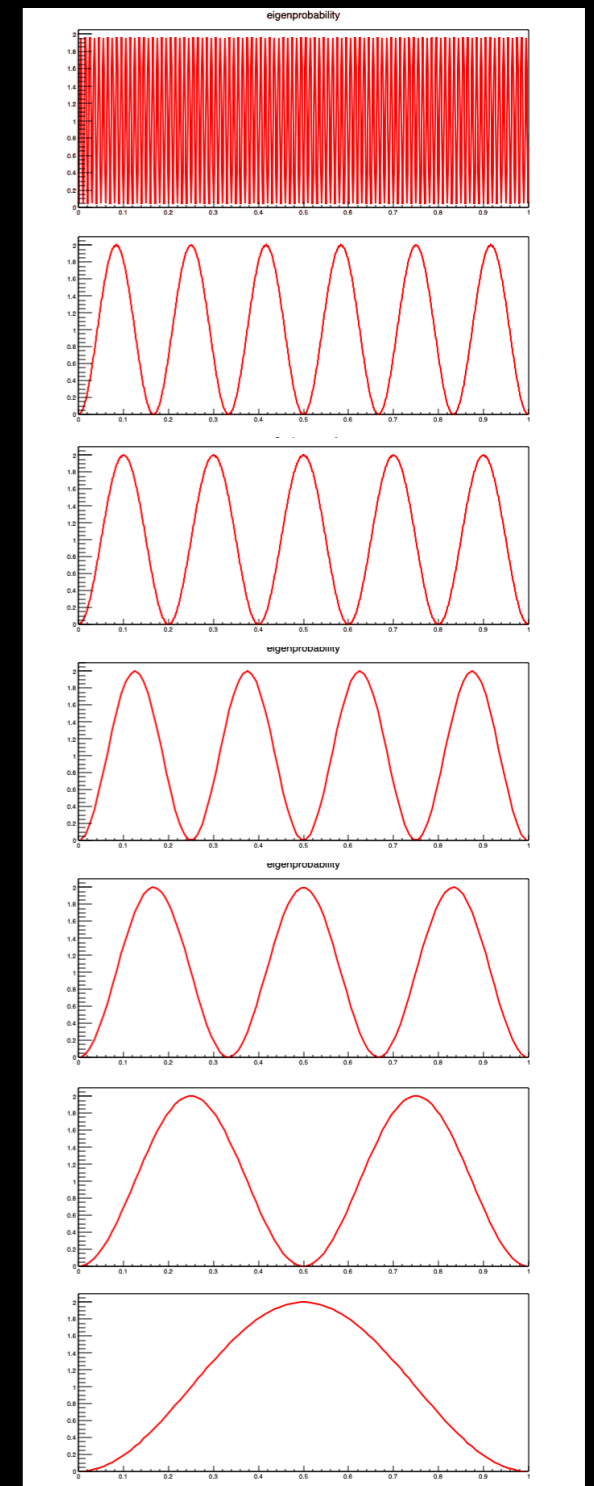
$$\psi_5(x), 25E_0, 5p_0$$

$$\psi_4(x), 16E_0, 4p_0$$

$$\psi_3(x), 9E_0, 3p_0$$

$$\psi_2(x), 4E_0, 2p_0$$

$$\psi_1(x), E_0, p_0$$



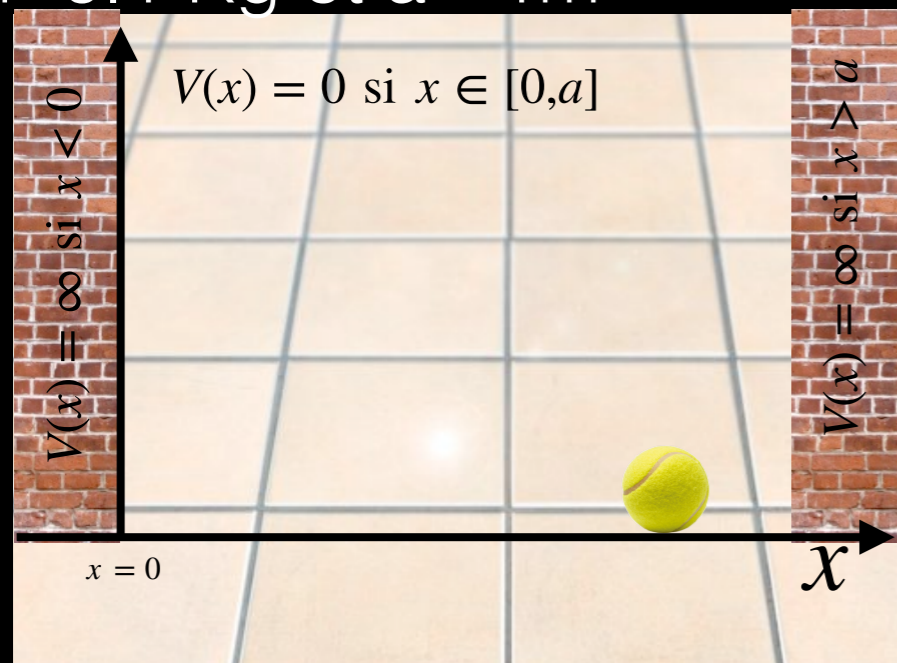
La balle de tennis et l'électron

Energie minimale Energie thermique

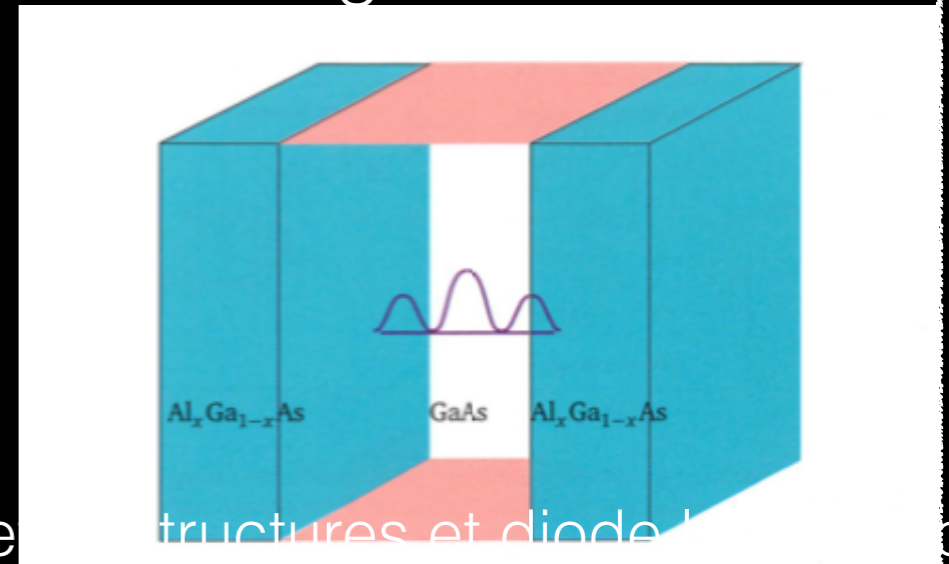
$$E_m = h^2/8ma^2$$

$$k_B T \sim 4 \times 10^{-21} \text{ J}$$

$m=0.1 \text{ Kg}$ et $a = 1\text{m}$



$m=9 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ et $a = 10 \text{ nm}$



$$k_B T \sim 4 \times 10^{-21} \text{ J} \rightarrow \Delta p \sim 3 \times 10^{-11} \text{ Kg m/s}$$

$$E_0 = 4 \times 10^{-67} \text{ J}$$

$$p_0 = 3 \times 10^{-34} \text{ kg m/s}$$

10²³ états disponibles!!!

$$k_B T \sim 4 \times 10^{-21} \text{ J} \rightarrow \Delta p \sim 8 \times 10^{-26} \text{ Kg m/s}$$

$$E_0 = 5 \times 10^{-22} \text{ J}$$

$$p_0 = 3 \times 10^{-26} \text{ kg m/s}$$

Cours de Maxime GUILBAUD

Solution générale de la particule dans le puit de potentiel

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left\{ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\} e^{-i \frac{n^2 E_0 t}{\hbar}}$$

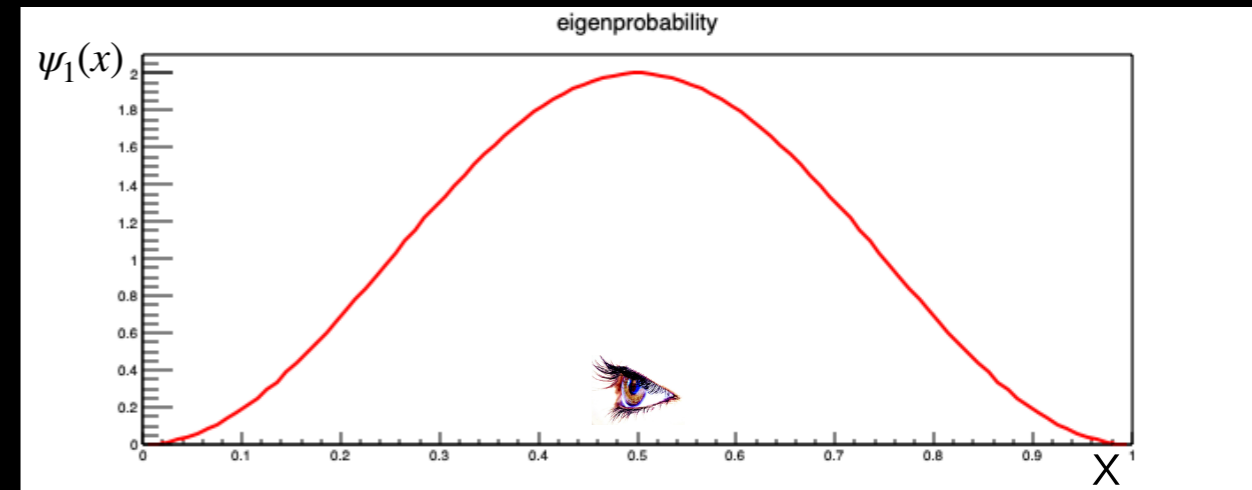
$$a_n = \int_0^a \Psi(x, 0) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx$$

Nombre imaginaire

Réduction de la fonction d'onde

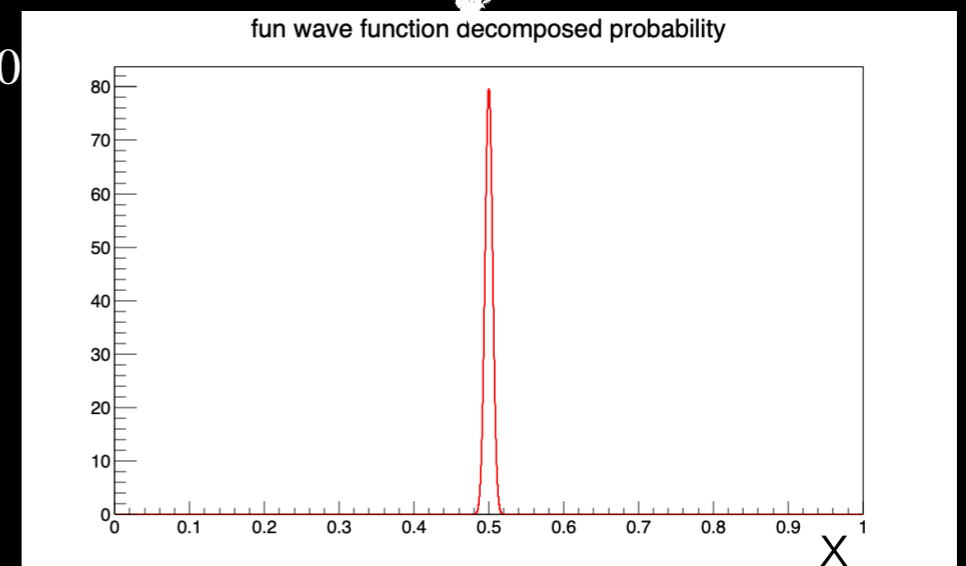
- Mesure de la position avec résolution meilleure que la fonction d'onde «détruit» la fonction d'onde à une nouvelle fonction
- C'est la réduction de la fonction d'onde
- Il est impossible de mesurer sans perturber la mesure
- Plus facile à comprendre avec le spin

$$\psi_1(x), E_0, p_0$$



Mesure de la position à $x=0.5$
Détecteur : Oui

$$\Psi_m(x, t = 0), \langle E \rangle > E_0$$



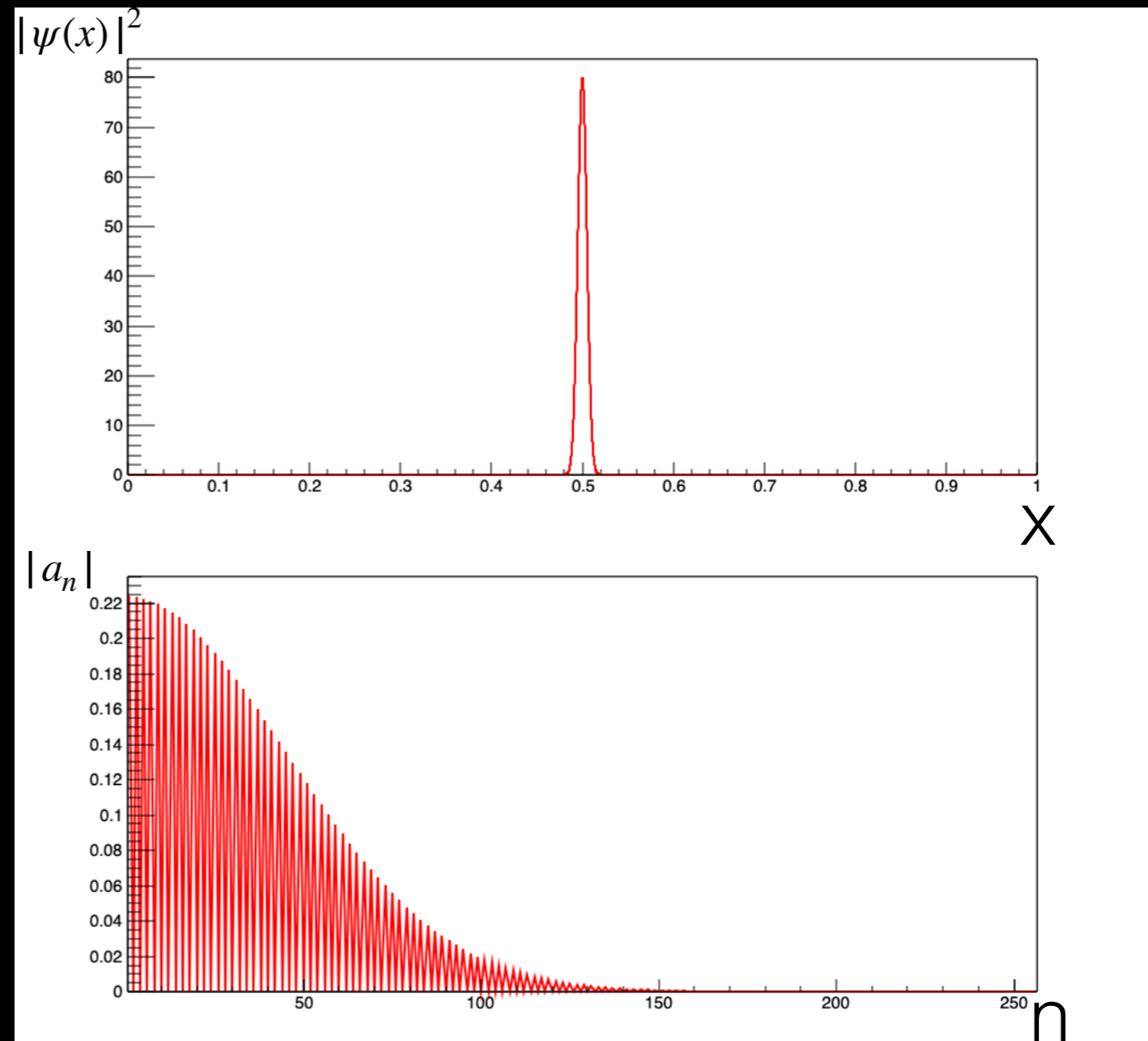
Application numérique : fonction d'onde gaussienne

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{4\sigma^2}} e^{if(x)}$$

$e^{if(x)} = 1$

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left\{ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\}$$



Application numérique : fonction d'onde gaussienne

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \langle \psi | \hat{\mathcal{X}} | \psi \rangle = \int_0^1 \psi^*(x) \hat{\mathcal{X}} \psi(x) dx = \int_0^1 \psi^*(x) x \psi(x) dx = \int_0^1 x |\psi(x)|^2 dx = \\ &= \int_0^1 x \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{2\sigma^2}} dx = 0.5\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \langle \psi | \hat{\mathcal{P}} | \psi \rangle = \int_0^1 \psi^*(x) \hat{\mathcal{P}} \psi(x) dx = \int_0^1 \psi^*(x) (-i\hbar) \frac{d\psi(x)}{dx} dx = \\ &= \int_0^1 2(x - 0.5) |\psi(x)|^2 dx = 0\end{aligned}$$

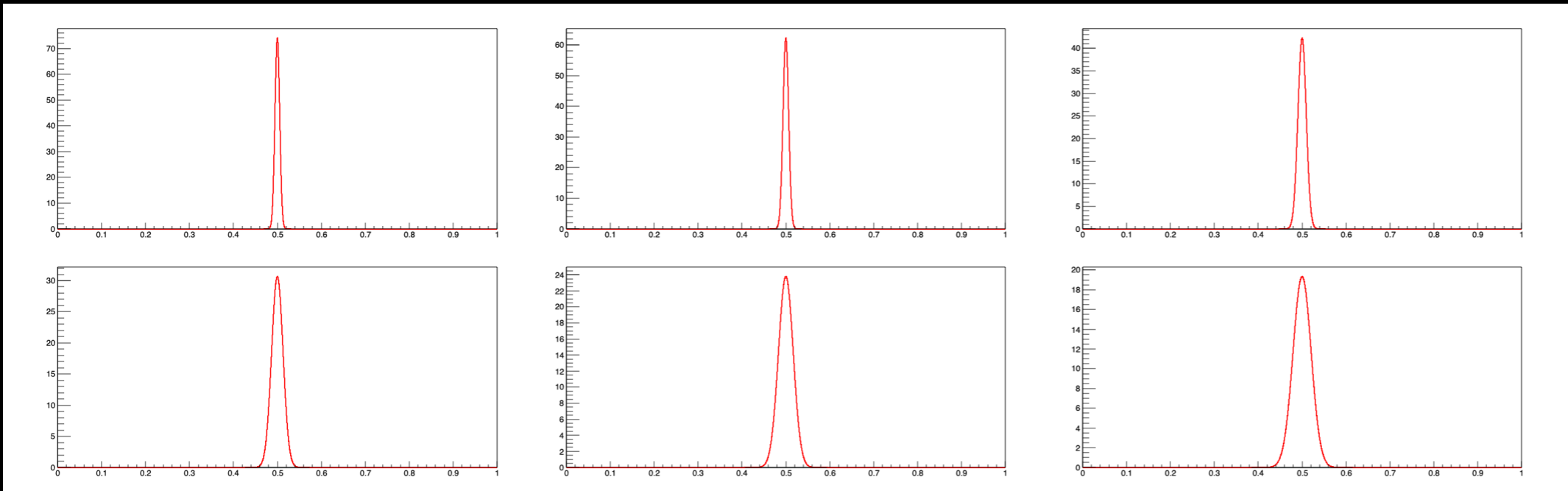
Vitesse nulle

Application numérique : évolution quantique de la fonction d'onde gaussienne

t=0

t=1

t=3



t=5

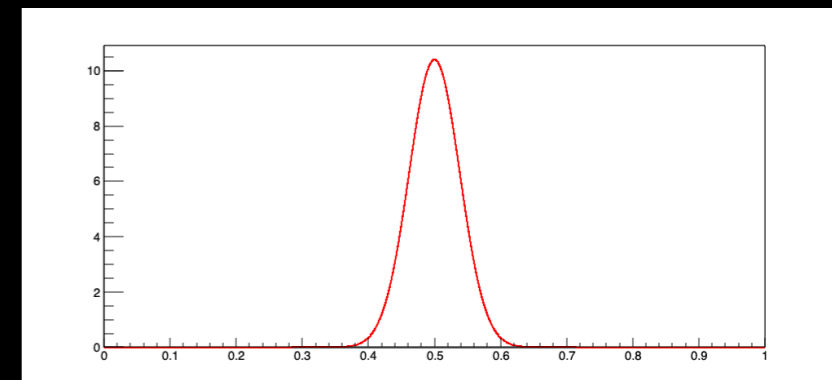
t=7

t=9

t=19

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left\{ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\} e^{-i \frac{n^2 E_0 t}{\hbar}}$$

Elargissement du paquet d'onde !



Application numérique : fonction d'onde gaussienne avec phase non constante

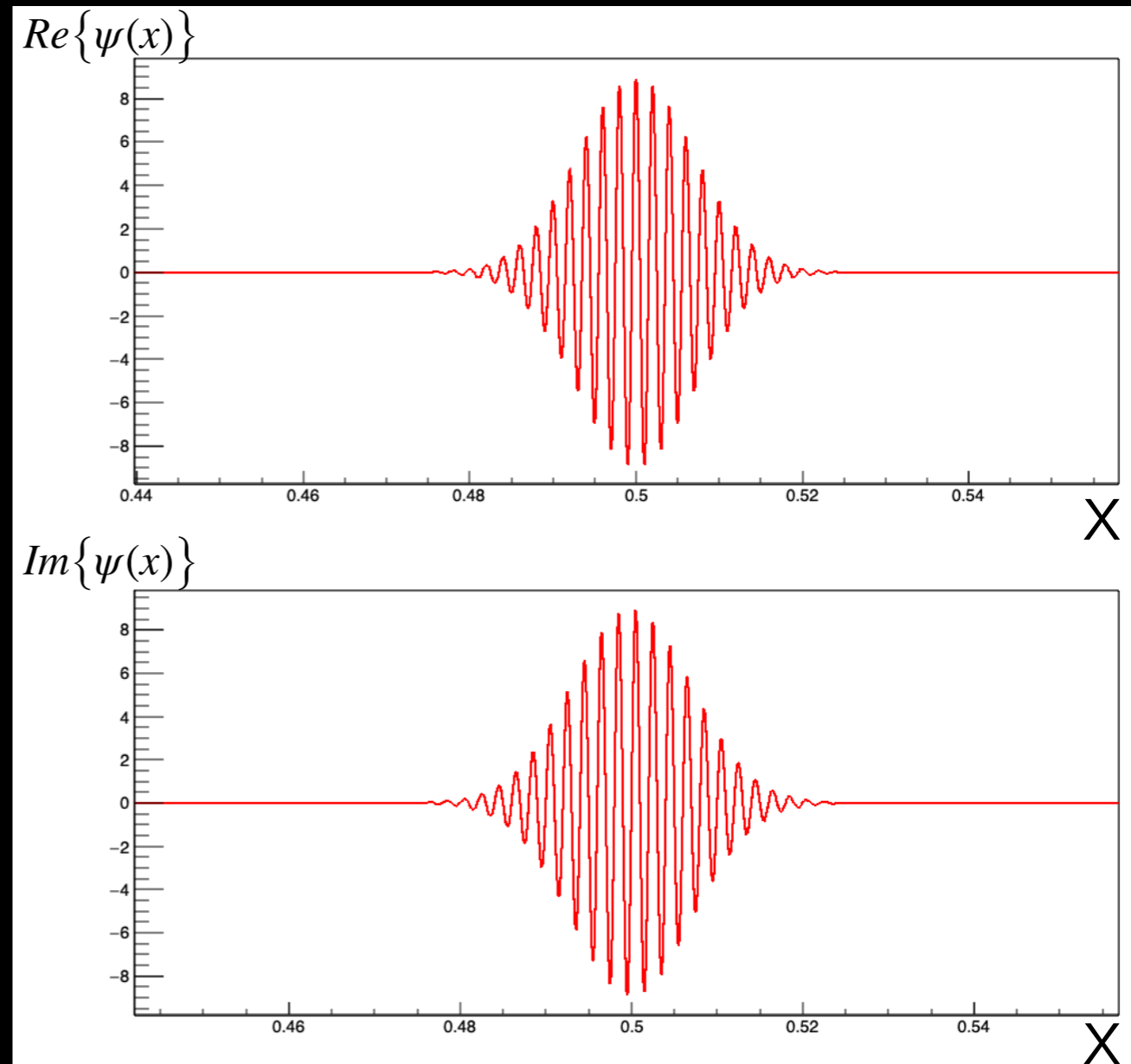
$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{4\sigma^2}} e^{if(x)}$$

$$e^{if(x)} = e^{ip_{\text{part}}x}$$

$$p_{\text{part}} = 1000$$

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left\{ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\}$$



Application numérique : fonction d'onde gaussienne avec phase non constante

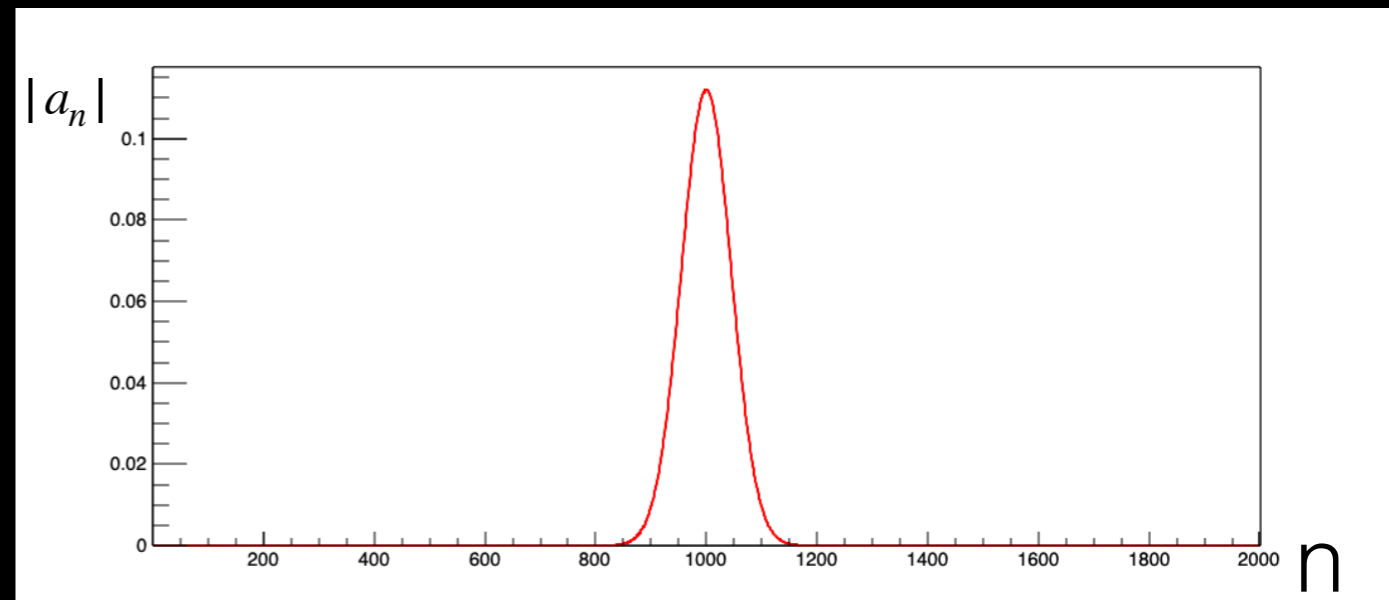
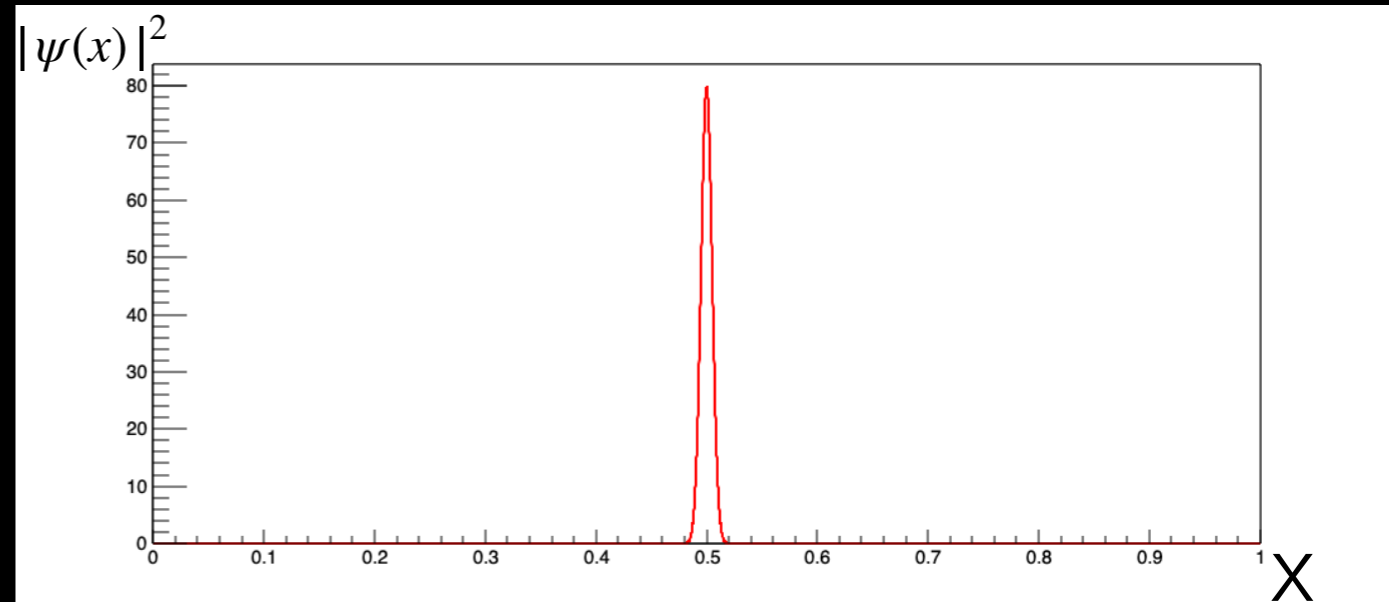
$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{2\sigma^2}}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{4\sigma^2}} e^{if(x)}$$

$$e^{if(x)} = e^{ip_{\text{part}}x}$$

$$p_{\text{part}} = 1000$$

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \left\{ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\}$$



Application numérique : la particule quantique qui rebondit

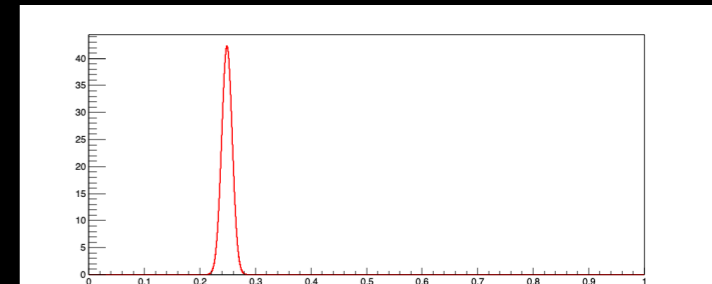
$$\langle x \rangle(t) = \int_0^1 x |\psi(x, t)|^2 dx =$$

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}} e^{-\frac{(x-0.5)^2}{4\sigma^2}} e^{ip_{\text{part}}x}$$

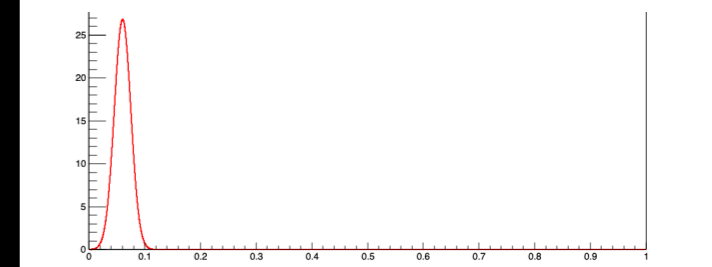
$$v = \frac{d\langle x \rangle}{dt} = p_{\text{part}}/m = \text{cte}$$

Comportement classique avec rebondissement élastique dans les bords du puits

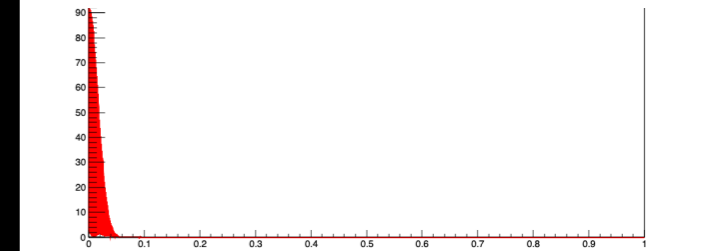
t=4



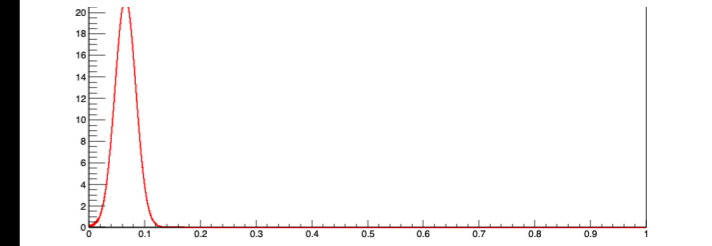
t=7



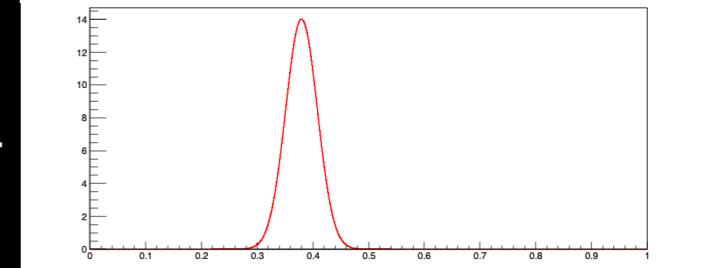
t=8



t=9



t=14



TD3 : Système quantique à 2 états (qbit)

L'espace de Hilbert se limite à deux états basiques ket possibles $|0\rangle = (1,0)$ et $|1\rangle = (0,1)$, avec toutes les combinaisons linéaires possibles

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = (\alpha, \beta), \text{ avec } \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

Les états sont normalisés $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, et la phase globale est arbitraire, donc 2 degrés de liberté (réelles) pour décrire l'état quantique d'un qbit (surface d'une sphère : Sphère de Bloch $\alpha = \cos(\theta/2)$ et $\beta = e^{i\phi} \sin \theta/2$)

Les grandeurs physiques \hat{Q} sont des matrices 2×2 \hat{Q} avec qui sont hermitiennes

$$q_{ij} = q_{ji}^*$$

Les matrices de Pauli sont une base orthonormale de dimension 3 des matrices hermitiennes 2×2

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma = a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3$$

$$(a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^3$$

$\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$
opérateur vecteur
en 3 D

Exercices

1. Trouver les vecteurs propres des matrices de Pauli
2. Calculer les commutateurs $[\sigma_i, \sigma_j]$
3. Calculer les anti-commutateurs $\{\sigma_i, \sigma_j\}$
4. Étudier l'évolution temporelle du ket $|\psi(t)\rangle$ pour un $|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ et un Hamiltonien $\hat{H} = \sigma_1$