Introduction à la

Physique Quantique

Notes prises au cours de M. Jacques Joseph, Professeur à l'École Centrale de Lyon, par Mathieu Goutelle (promotion 2002)

« Si vous avez compris ce que j'ai voulu dire, c'est que je me suis mal exprimé. »
Alan Greenspan

novembre 2000

Avertissement

Ces notes sont la transcription du cours de Physique Quantique donné en 2001. Elles sont destinées à faciliter le travail des élèves, qui assistent au cours, en les dispensant du travail de « moine copiste ». Bien que le travail de transcription de Mathieu Goutelle soit remarquable, il ne représente qu'un aspect du cours. Dans cet exercice écrit, l'outil mathématique semble plus important que les explications physiques. Cette déformation inévitable démontre que la lecture de ce document ne dispense pas de l'assistance au cours et de la consultation des ouvrages de référence.

Jacques Joseph

1 Introduction

1.1 Présentation

Aujourd'hui, la compréhension des phénomènes quantiques permettent de fabriquer des dispositifs nouveaux : transistor à un électron, laser à un photon... La Physique Quantique mène souvent à des idées nouvelles qui ouvrent des champs nouveaux, comme la cryptographie quantique.

La Physique classique est basée sur le concept de points matériels, affectés d'un coefficient d'inertie (ou masse), qui interagissent entre eux par des liaisons matérialisées par des forces. La nature du point matériel n'intéresse pas le mécanicien ! De même qu'en Électromagnétisme, on ne cherche pas à savoir la nature de la charge.

On adopte plutôt en Physique Quantique une approche pragmatique, capable de prévoir le résultat de la mesure en tenant compte de la perturbation amenée par cette mesure. La question devient alors : que verra-t-on quand on va observer ? Ce qui se passe quand personne n'observe n'a aucune importance.

1.2 Historique

La Physique Quantique a toujours évolué grâce à des expériences.

L'effet photoélectrique (1905, prix Nobel pour Albert Einstein). Le photon doit avoir assez d'énergie pour arracher un électron à la matière, indépendamment de la puissance de la source.

Le rayonnement du corps noir. En 1899-1900, Max Planck s'intéresse profondément aux problèmes d'actualité concernant l'énergétique et l'entropie et découvre une formule permettant d'expliquer la « catastrophe ultraviolette » [1].

Diffraction des électrons. En 1925, Louis de Broglie élabore la mécanique ondulatoire en associant des ondes aux divers corpuscules (électrons, protons, etc.).

[1] La constante de Planck $\hbar$ célèbre d'ailleurs son centenaire cette année, exactement le 14 décembre 2000.

Interprétation statistique de la Physique Quantique. Niels Bohr et Werner Karl Heisenberg ont contribué, de 1913 à 1924, à la profonde transformation de la théorie de la connaissance qui résulte de la forme essentiellement statistique des lois de la mécanique quantique.

Développement de la théorie des champs ou physique quantique relativiste (Heisenberg, Dirac, Pauli, Werner...), 1924-1925. Les particules ont un double aspect, ondulatoire et corpusculaire. Qu'en est-il des champs électromagnétiques ? Eux aussi peuvent être quantifiés. Par exemple, dans ce contexte, l'émission stimulée prend place naturellement.

Depuis plusieurs années, la Physique Quantique n'a pas connu de grands bouleversements, mais elle est confrontée à des problèmes d'interprétation, notamment le caractère probabiliste. La perte du déterminisme gênait certains physiciens (de Broglie et Einstein entre autres) qui avançaient alors l'hypothèse de l'existence de variables cachées qui nous feraient croire à cette interprétation probabiliste. De nombreux faits expérimentaux ont depuis convaincu les physiciens qu'il n'existe pas de variable cachée et l'interprétation probabiliste est admise de tous.

2 Le comportement quantique

Nous allons tenter ici de mettre en évidence les différences et similitudes entre trois concepts : la particule « classique », l'onde et la particule quantique, au travers d'une expérience simple. Grâce à une source, on envoie des particules sur un obstacle pourvu de deux fentes et on mesure au moyen d'un détecteur la fréquence d'arrivée des particules en fonction de la position x du détecteur.

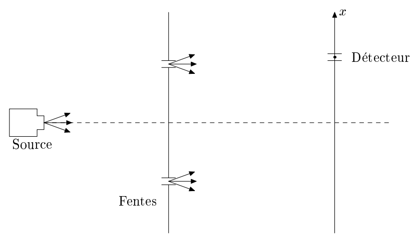


FIG. 1 – Expérience d'interférence

2.1 La particule « classique »

La source est un très mauvais fusil de chasse et on mesure la fréquence d'arrivée des particules (les plombs de chasse). Si l'on réalise l'expérience en fermant l'une puis l'autre des fentes, on obtiendra deux courbes équivalentes f_1 et f_2 décalées par rapport à l'origine. En ouvrant les deux fentes, la courbe deviendra la somme des deux précédentes $f_1 + f_2$, respectant le comportement classique des particules : on pourra distinguer les particules étant passées par l'une ou l'autre fente. La mesure est discrète : c'est le nombre des plombs. Le résultat est une probabilité.

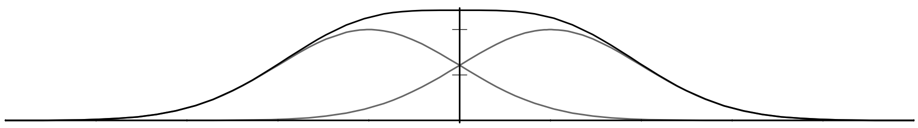


FIG. 2 – Résultat de l'expérience dans le cas d'une particule « classique »

2.2 L'onde

Si on pratique la même expérience avec une onde (lumineuse par exemple), on pourra appliquer la théorie de Huyghens-Fresnel et considérer les deux fentes comme deux sources secondaires qui interfèrent sur l'écran. Si, comme précédemment, on réalise l'expérience en fermant successivement chaque fente, on obtient les images des deux fentes respectivement ouvertes ($I_1 = |\varphi_1|^2$ et $I_2 = |\varphi_2|^2$). En revanche, si les deux fentes sont ouvertes, les deux sources cohérentes interfèrent et une figure d'interférences se forme sur l'écran ($I_{12} = |\varphi_1 + \varphi_2|^2$). La mesure est ici une intensité, donc une variable continue.

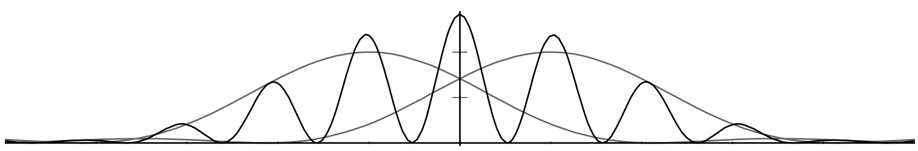


FIG. 3 – Résultat de l'expérience dans le cas d'une onde

2.3 La particule quantique

Si l'expérience est réalisée à nouveau avec un canon à électrons comme source, l'ouverture successive des fentes donnera le même résultat que précédemment ($P_1 = |\Phi_1|^2$ et $P_2 = |\Phi_2|^2$). Mais, lorsque les deux fentes sont ouvertes, les électrons ne se comportent pas comme des particules : $P_{12} \neq P_1 + P_2$. On obtient des courbes semblables à celles des ondes, comme si l'électron passait par les deux trous à la fois. La mesure est ici une probabilité.

En fait, même si l'on envoie les électrons un par un et très espacés dans le temps, on observe encore la figure d'interférence : on ne peut pas dire par quelle fente l'électron est passé et il interfère avec lui-même. Si on exige de savoir par où il est passé, par exemple en éclairant les fentes, les interférences disparaissent (interaction de la mesure avec l'expérience).

Ce genre de perturbation due à la mesure est connue depuis longtemps et semble naturel, par exemple lorsque l'on branche un voltmètre dans un circuit. Mais, dans ce cas, on peut s'affranchir de l'effet de la mesure en augmentant l'impédance d'entrée du voltmètre. Ici, la perturbation est irréductible : si l'on mesure le passage par diffusion de photons par l'électron et que l'on diminue le nombre de photons ou la longueur d'onde utilisée, la figure d'interférence disparaît (ou l'on ne détecte plus le passage de l'électron...).

3 Mécanique ondulatoire

3.1 Rappels de probabilité

Variable aléatoire discrète Une variable aléatoire discrète X est une fonction qui prend pour valeurs de façon aléatoire l'ensemble des x_i. Les nombres n_i correspondent au nombre de fois que la variable X prend la valeur x_i. Si $N = \sum_i n_i$, on note la fréquence f_i : $f_i = n_i/N$. Si $N \to +\infty$, $f_i \to p_i$. Les p_i sont les probabilités. On mesure des fréquences, jamais des probabilités.

Variable aléatoire continue Soit Θ une variable aléatoire continue. On note $p(\theta)$ la densité de probabilité, $\theta \in [0; 2\,\pi]$. Alors $p(\theta)\,\mathrm{d}\theta$ représente la probabilité de $\Theta = \theta$. On a évidemment :

$$\int_0^{2\,\pi} p(\theta)\,\mathrm{d}\theta = 1$$

Valeur moyenne $\langle\varphi\rangle = \int \varphi \cdot p$. On définit alors le moment d'ordre m par $\langle x^m\rangle = \int x^m\,p(x)\,\mathrm{d}x$. On notera notamment :

$$\langle x^0\rangle = 1; \quad \langle x^1\rangle = \overline{x}; \quad \sigma^2 = \langle (x-\overline{x})^2\rangle = \langle x^2\rangle - \overline{x}^2$$

3.2 Notion d'opérateur

Soit $f, g \in H^2$, espace de Hilbert. On définit un produit scalaire par :

$$\int f^* \cdot g = \langle f|g\rangle$$

et la norme induite : $\|f\|^2 = \langle f|f\rangle = \int f^* \cdot f$. On dira alors qu'une fonction est normée si $\|f\| = 1$.

Un opérateur A est une opération de H^2 dans H^2 : $A\,f = g$. Un opérateur est dit linéaire si et seulement si :

$$A\,(\lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2) = \lambda_1\,A\,f_1 + \lambda_2\,A\,f_2$$

Exemples d'opérateurs Nous pouvons en citer deux qui auront une importance toute particulière dans la suite : la multiplication par une fonction et la dérivation.

$$\forall x, \quad (g\cdot f)(x) = g(x)\,f(x)$$
$$\forall x, \quad \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x) = f'(x)$$
$$\vec{\nabla}\,f = \overrightarrow{\mathrm{grad}}\ f\ ; \qquad \vec{\nabla}.\vec{f} = \mathrm{div}\ \vec{f}\ ; \qquad \vec{\nabla}\wedge\vec{A} = \overrightarrow{\mathrm{rot}}\ \vec{A}$$

Deux opérateurs A et B ne commutent pas forcément. Il est donc intéressant d'introduire le commutateur de A et B défini par :

$$[A,B] = A\,B - B\,A$$

C'est un opérateur. On peut démontrer alors les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} [A,B] &= -[B,A] \\ [A,B+C] &= [A,B] + [A,C] \\ [A,B\,C] &= [A,B]\,C + B\,[A,C] \end{aligned}$$

Par exemple, si l'on calcule le commutateur du produit par une fonction et de la dérivation, il vient :

$$\begin{aligned}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, f\right]\Psi &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f - f\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\Psi \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(f\,\Psi) - f\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi \\ &= \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f\right)\Psi + f\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi\right) - f\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi\right)\end{aligned}$$

On en déduit que les deux opérateurs, multiplication par une fonction et dérivation, ne commutent pas et même :

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, f\right] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f$$

et en particulier, si f est égal à l'identité :

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, x\right] = 1$$

Il est bon aussi d'introduire la notion de vecteurs et de valeurs propres d'un opérateur. Soit A un opérateur. Les valeurs propres (a_n) et les vecteurs propres (Ψ_n) sont tels que :

$$A\,\Psi_n = a_n\,\Psi_n$$

Par exemple, pour l'opérateur dérivation $\vec{\nabla}$, on a :

$$\vec{\nabla}\ \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}} = i\vec{k}\,\mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

ou pour l'opérateur Laplacien $\vec{\nabla}^2$:

$$\begin{aligned}\vec{\nabla}^2 &= \tfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial y^2} + \tfrac{\partial^2}{\partial x^2} = \Delta \\ \vec{\nabla}^2\ \mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}} &= -\vec{k}^2\,\mathrm{e}^{i\,\vec{k}\cdot\vec{r}}\end{aligned}$$

Souvent, à une valeur propre a_n ne correspond pas un seul vecteur propre Ψ_n mais un sous-espace de dimension i, $i \geq 1$. On parle de dégénérescence de degré i. Par exemple, $\vec{\nabla}$ et $\vec{\nabla}^2$ ont des degrés de dégénérescence différents : pour une valeur propre $-\vec{k}^2$, $\exp(i\,\vec{k}\cdot\vec{r})$ et $\exp(-i\,\vec{k}\cdot\vec{r})$ sont vecteurs propres de l'opérateur Laplacien : la dégénérescence est d'ordre deux. En revanche, pour chaque $i\vec{k}$, il existe un unique vecteur propre associé de l'opérateur gradient : il n'y a pas de dégénérescence.

3.3 Superposition des ondes : paquet d'ondes

On associe à une particule une onde plane : $A\ \exp\ i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega\,t)$. À une particule $(E, \vec{p})$, on associe l'onde $(\omega, \vec{k})$ tel que :

$E = \hbar\omega$	Relation d'Einstein
$\vec{p} = \hbar\,\vec{k}$	Relation de de Broglie

Le problème est que l'onde plane a une amplitude A *dans tout l'espace* : on ne peut donc pas localiser la particule. Pour pouvoir la localiser, il suffit donc de prendre une combinaison linéaire d'ondes planes (ou paquet d'ondes) :

$$\Psi(\vec{r},t) = \int A(\vec{k})\, \mathrm{e}^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega\, t)}\, \mathrm{d}\vec{k}$$

Dans une onde, l'invariant, c'est la fréquence. Il existe une relation de dispersion $\omega(\vec{k})$ liant ω et $\vec{k}$, qui dépend du milieu de propagation. Maintenant, on a la solution et on cherche l'équation de propagation... Par raison de simplification, nous allons nous limiter à des particules à une dimension.

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \int A(\vec{k})\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p\,x-E\,t)}\, \mathrm{d}p \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= \int A(\vec{k})\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p\,x-E\,t)} E\, \mathrm{d}p \\
-\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi &= \int A(\vec{k})\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(p\,x-E\,t)} p^2\, \mathrm{d}p
\end{aligned}$$

En considérant une particule classique sans interaction, on peut tenir compte de l'équation :

$$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2\,m}$$

qui conduit à

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi$$

On peut en déduire une règle plus générale, *le principe de correspondance*, qui à une grandeur « classique » fait correspondre un opérateur, en généralisant alors pour une particule à trois dimension :

$$\begin{aligned}
E &\Longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \\
\vec{p} &\Longrightarrow \frac{\hbar}{i}\,\vec{\nabla}
\end{aligned}$$

À partir de ce principe, on peut écrire l'équation de propagation pour une particule soumise à un potentiel $V(\vec{r})$:

$$\begin{aligned}
E &= \frac{\vec{p}^{\,2}}{2\,m} + V(\vec{r}) \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})\right]}_{\mathscr{H}}\Psi \qquad (1)
\end{aligned}$$

que l'on désigne comme l'équation de Schrödinger. $\mathscr{H}$ est l'opérateur Hamiltonien. Il est clair que tous les problèmes ne peuvent pas s'écrire de cette façon : V peut dépendre d'autres variables ou ne pas être simplement scalaire mais vectoriel (comme en Électromagnétisme).

On peut faire quelques remarques à propos de l'équation (1). Cette équation est non-relativiste, comme son équation de départ : les dérivées en temps et en espace ne figurent pas sur le même plan. Si l'on prend comme point de départ l'équation relativiste $E^2 = p^2\,c^2 + m^2\,c^4$, il vient l'équation de Klein-Gordon :

$$-\hbar^2\,\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = -\hbar^2 c^2\ \vec{\nabla}^2\ \Psi + m^2 c^4\ \Psi$$

Ensuite, l'équation (1) est linéaire, donc la solution est définie à une constante près. Il faut rajouter une condition pour connaître la norme. La solution est de plus complexe par nature. Enfin, si le potentiel est indépendant du temps, on peut écrire la solution comme une fonction à variable séparée : $\Psi(\vec{r},t) = A(t)\,\varphi(\vec{r})$. L'équation (1) peut s'écrire :

$$i\hbar\frac{\partial A/\partial t}{A} = \frac{\mathscr{H}\,\varphi}{\varphi} = E$$

On écrit alors l'équation (2), dite équation de Schrödinger indépendante du temps, qui se transforme en un problème spectral pour l'opérateur $\mathscr{H}$:

$$\left\{\begin{array}{lcl} A(t) & = & \exp(-i\,\frac{E}{\hbar}t) = \exp(-i\,\omega t) \\ \mathscr{H}\,\varphi & = & E\varphi \end{array}\right. \tag{2}$$

Comme l'énergie E correspond aux valeurs propres de $\mathscr{H}$, on voit aussi apparaître le principe de quantification de l'énergie.

3.4 Interprétation de la fonction d'onde

Maintenant que l'on a associé à toute particule une fonction d'onde, on doit se poser le problème de l'interprétation de la fonction d'onde. Nous allons nous limiter au cas stationnaire. La fonction d'onde est reliée à la particule en tant que densité de probabilité de présence $p(\vec{r})$ en un point de l'espace[2], ou plus exactement :

$$\mathrm{d}p = |\Psi(\vec{r},t)|^2\mathrm{d}\vec{r} = p(\vec{r})\,\mathrm{d}r$$

S'il existe deux solutions Ψ_1 et Ψ_2 à un problème, on a $p(\vec{r}) = |\Psi_1 + \Psi_2|^2$ et on peut alors comprendre le comportement de l'expérience d'interférence. De plus, Ψ doit être de carré sommable puisque :

$$\int \mathrm{d}p = \int p(\vec{r})\,\mathrm{d}\vec{r} = \int |\Psi(\vec{r},t)|^2\mathrm{d}\vec{r} = 1$$

Deux problèmes apparaissent. Le premier est conceptuel : on ne sait plus où est une particule ; on connaît simplement sa probabilité de présence. On ne peut donc plus prévoir le résultat d'une mesure ; on abandonne la notion de déterminisme en Physique. Ce problème a pu faire penser que cette théorie était incomplète et qu'il existait des variables cachées.

Le second problème vient des ondes planes : en effet, cette interprétation vaut uniquement pour les fonctions de carré sommable, ce qui n'est pas le cas des ondes planes. Nous allons examiner ce cas par la suite.

[2]Cette interprétation est historiquement appelée interprétation de Copenhague.

3.5 Équation de continuité – Notion de courant

Écrivons l'équation obtenue en conjuguant l'équation (1) puis en soustrayant membre à membre après avoir multiplié respectivement par Ψ^* et par Ψ. On obtient ainsi, pour un potentiel réel :

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi \, \Psi^* + \frac{\partial}{\partial t} \Psi^* \, \Psi \right) = -\frac{\hbar^2}{2\,m} \left(-\Psi \, \vec{\nabla}^2 \, \Psi^* + \Psi^* \, \vec{\nabla}^2 \, \Psi \right)$$

Or $\vec{\nabla}(\Psi^* \, \vec{\nabla} \, \Psi - \Psi \, \vec{\nabla} \, \Psi^*) = \Psi \, \vec{\nabla}^2 \, \Psi^* - \Psi^* \, \vec{\nabla}^2 \, \Psi$, donc :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi \Psi^*| = -\frac{\hbar^2}{2\,m} \, \vec{\nabla}(\Psi^* \, \vec{\nabla} \, \Psi - \Psi \, \vec{\nabla} \, \Psi^*)$$

L'équation s'écrit alors, en posant $\overrightarrow{S} = \frac{\hbar}{2im} \left(\Psi^* \, \vec{\nabla} \, \Psi - \Psi \, \vec{\nabla} \, \Psi^* \right)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \|\Psi\|^2 + \mathrm{div} \, \overrightarrow{S} = 0$$

Cette équation s'identifie formellement à l'équation de continuité en Électrocinétique (ρ est la densité de charge) :

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \mathrm{div} \, \vec{j} = 0 \qquad \text{avec } \vec{j} = \rho \, \vec{v}$$

Si $\Psi = A \, \exp \, i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega \, t)$, il vient $\overrightarrow{S} = \frac{\hbar}{m} |A|^2 \, \vec{k} = |A|^2 \, \vec{v}$. On décrit donc un groupe de particules et $\overrightarrow{S}$ s'identifie à un flux de probabilité. À partir du rapport de ces flux, il est alors possible de définir des coefficients de transmission et de réflexion d'un flux de particules se propageant sur des barrières de potentiel.

3.6 Applications

Nous allons donner maintenant deux exemples simples.

3.6.1 Puits de potentiel fini

Un électron est situé dans un puits de potentiel de largeur a, de profondeur V_0. On étudie les états liés de l'électron, *i.e.* ceux dont l'énergie E des électrons est comprise entre 0 et V_0.

Le problème est ici indépendant du temps. On peut donc écrire dans notre cas l'équation (2), soit, avec $\varphi(x)$ la solution stationnaire, qui doit être uniformément continue et de carré sommable :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi &= E \, \varphi & \text{si } |x| < a/2 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\varphi &= (E - V_0) \, \varphi & \text{si } |x| > a/2 \end{cases}$$

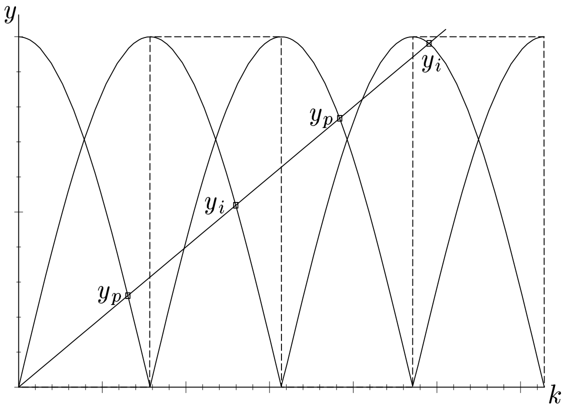
Étant donné que le problème est uni-dimensionnel, il vient, en numérotant les différents milieux de la gauche vers la droite et en introduisant k, k_0 et Q tel que :

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \qquad V_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} \qquad V_0 - E = \frac{\hbar^2 Q^2}{2m}$$

$$\begin{cases} \varphi(x) &= A_2 \exp ikx + B_2 \exp -ikx & \text{si } |x| < a/2 \\ \varphi(x) &= A_{1,3} \exp Qx + B_{1,3} \exp -Qx & \text{si } |x| > a/2 \end{cases}$$

La sommabilité de φ impose $A_3 = B_1 = 0$. De plus, la symétrie du problème impose : $|\varphi(x)|^2 = |\varphi(-x)|^2$, donc φ est paire ou impaire. En effet, seule la densité de probabilité a une réalité physique et vérifie les symétries du problème. Nous devons aussi écrire la continuité de φ et de φ' en $x = \pm a/2$. La continuité de φ' provient de l'équation de Schrödinger (2), puisque $V - E$ est bornée. On obtient deux types de solutions qui coexistent, selon que φ est paire ou impaire.

$$\left\{\begin{array}{llll} \left|\cos \frac{ka}{2}\right| = \frac{k}{k_0} & \text{et} & \tan \frac{ka}{2} < 0 & \text{si } \varphi \text{ est paire} \\ \left|\sin \frac{ka}{2}\right| = \frac{k}{k_0} & \text{et} & \tan \frac{ka}{2} > 0 & \text{si } \varphi \text{ est impaire} \end{array}\right.$$



$$\begin{array}{rcl} y_p & = & \left|\cos \dfrac{ka}{2}\right| \\ y_i & = & \left|\sin \dfrac{ka}{2}\right| \\ y & = & \dfrac{k}{k_0} \end{array}$$

FIG. 4 – Détermination des états du puits de profondeur finie

Il n'existe pas d'état $E = 0$ car il est interdit par la relation d'incertitude d'Heisenberg. On peut aussi remarquer, que pour $k \leq k_0 = \pi/a$, il n'y a qu'un seul état possible. La valeur de V_0 correspondante est : $V_{\text{min}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m\, a^2}$. Le nombre d'états possibles dans le puits est donnée par la formule :

$$N = \left\lfloor \frac{k_0}{\pi/a} \right\rfloor + 1 = \left\lfloor \sqrt{\frac{V_0}{V_{\text{min}}}} \right\rfloor + 1$$

3.6.2 Barrière de potentiel fini

On étudie cette fois une barrière de potentiel de hauteur finie V_0, de largeur a sur laquelle se dirige un flux d'électrons monocinétiques (de la gauche vers la droite). L'équation de Schrödinger devient :

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_{1,3} & = & E\,\varphi_{1,3} & \text{si } x < 0 \text{ ou } x > a \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi_2 & = & (E - V_0)\,\varphi_2 & \text{si } 0 < x < a \end{array}\right.$$

Alors, en utilisant les mêmes notations que précédemment, on trouve :

$$\begin{array}{rcl} \varphi_{13}(x) & = & A_{1,3}\,\mathrm{e}^{-ikx} + B_{1,3}\,\mathrm{e}^{ikx} \\ \varphi_2(x) & = & A_2\,\mathrm{e}^{-Qx} + B_2\,\mathrm{e}^{Qx} \end{array}$$

De par le principe de causalité, on doit obligatoirement avoir $A_3 = 0$ (pas d'onde se propageant vers la gauche dans le milieu 3). Ensuite, en écrivant chacune des conditions aux limites, on détermine les constantes d'intégrations. Après des calculs un peu fastidieux, on trouve notamment :

$$\frac{B_1}{B_3} = \frac{1}{4ikQ}\left((ik+Q)^2 \mathrm{e}^{(ik-Q)a} - (ik-Q)^2 \mathrm{e}^{(ik+Q)a}\right)$$

Ce rapport est particulièrement important car, en notant τ le coefficient de transmission en énergie, on a : $\tau = \left|\frac{B_3}{B_1}\right|^2$. On a donc, après calcul :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{16k^2Q^2}\left[(Q^2-k^2)(\mathrm{e}^{-2aQ} + \mathrm{e}^{2aQ} - 2) + 4k^2Q^2(\mathrm{e}^{-2aQ} + \mathrm{e}^{2aQ} + 2)\right]$$

Avec les approximations suivantes : $\mathrm{e}^{2aQ} \gg \mathrm{e}^{-2aQ}$ et $\mathrm{e}^{2aQ} \gg 2$, on obtient alors pour τ :

$$\tau = \left(\frac{4kQ}{k_0^2}\right)^2 \mathrm{e}^{-2aQ}$$

Donc, τ augmente quand a diminue ou quand Q, soit $V_0 - E$ diminue. Si l'on examine des ordres de grandeurs, on a, pour une personne de 80 kg se déplaçant à 1 m.s^{-1} et se heurtant à un mur de 2 m de haut et de 10 cm d'épaisseur ($V_0 = mgh$), $\tau = 0{,}39 \times \mathrm{e}^{-2.10^{36}} \approx 0$. Pour un électron d'énergie 13,6 eV se heurtant à une barrière de potentiel de 20 eV et d'épaisseur 1 Å, on trouve $\tau = 22{,}7\,\%$ ce qui montre qu'une part importante d'électrons (presque un quart !) traversent la barrière de potentiel[3].

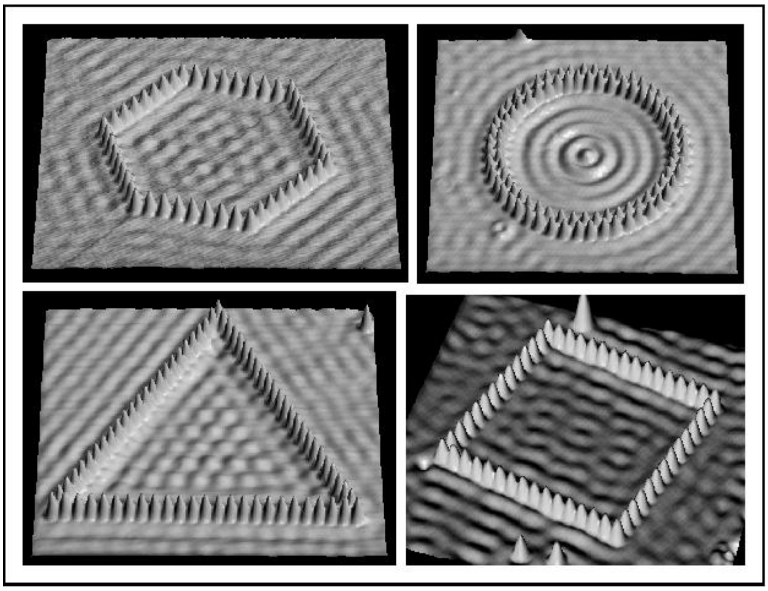


FIG. 5 – Exemple d'images obtenues par microscopie à effet tunnel

Ce comportement met en évidence l'effet tunnel, à la base des diodes et des microscopes à effet tunnel. Le principe de ces derniers est le suivant : une électrode à laquelle on applique un potentiel V est déplacée au dessus d'une

[3]mais que l'on se fera toujours mal en fonçant contre un mur !

surface conductrice, placée au potentiel zéro, rugueuse à l'échelle atomique ou moléculaire. L'intensité circulant entre l'électrode donnera une idée très précise de la surface puisqu'elle est fonction du coefficient de transmission des électrons et donc de la distance entre l'électrode et la surface. On arrive donc à détecter les variations de hauteur ou de densité électronique à la surface (cf. figure 5).

4 Principe de la Mécanique Quantique

Nous allons donner une formulation de la Mécanique Quantique *a priori* à partir de postulats.

4.1 Postulats

Postulat 1 (Fonction d'onde – État) *L'état d'une particule scalaire*[4] *est entièrement décrit par une fonction d'onde* Ψ*, élément d'un espace de Hilbert.* $|\Psi|^2$ *est la densité de probabilité de présence de la particule.*

Postulat 2 (Grandeurs physiques) *Toute grandeur physique* $\mathscr{A}$ *est représentée par un opérateur hermitique* A[5] *agissant sur la fonction d'onde.*

On a alors : $A\,\varphi_n = a_n\,\varphi_n$ avec $(a_n)_n \in \mathbb{R}$ et $\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \delta_{nm}$. On en déduit alors *la relation de fermeture* :

$$\sum_n \varphi_n^*(\vec{r})\,\varphi_n(\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')$$

Une liste non-exhaustive des opérateurs associés aux grandeurs physiques est dressée dans le tableau 1.

Grandeur physique	Opérateur associé
position : $\vec{r}$	$\vec{r}\cdot$
impulsion : $\vec{p}$	$-i\hbar\,\vec{\nabla}$
énergie cinétique : $\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\vec{\nabla}^2$
énergie : $\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+V(\vec{r})$	$\mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\vec{\nabla}^2 + V(\vec{r})$
moment cinétique : $\vec{r}\wedge\vec{p}$	$\vec{r}\wedge i\hbar\,\vec{\nabla}$

TAB. 1 – Opérateurs associés aux grandeurs physiques

Postulat 3 (Mesure) *Le résultat de la mesure d'une grandeur physique ne peut être que l'une des valeurs propres de l'opérateur correspondant.*

On voit ici apparaître la notion de quantification. Si on mesure $\mathscr{A}$ *sur un système décrit par la fonction d'onde* Ψ*, la probabilité* $p(a_n)$ *d'obtenir la valeur propre* a_n *pour* $\mathscr{A}$ *est :*

$$p(a_n) = |\langle\varphi_n|\Psi\rangle|^2 = \left|\int \varphi_n^*\,\Psi(\vec{r},t)\,\mathrm{d}\vec{r}\right|^2$$

[4] Toute l'information se réduit à un scalaire. Cela n'est pas applicable au photon par exemple, où l'on a besoin d'une grandeur vectorielle pour rendre compte de la polarisation.

[5] ou auto-adjoint : $A = {}^tA^*$.

Postulat 4 (Réduction du paquet d'onde) *Si la mesure de la grandeur $\mathscr{A}$ sur le système décrit par Ψ donne le résultat a_n, l'état du système immédiatement après la mesure sera décrit par la fonction d'onde φ_n associée à la valeur propre a_n.*

Cette perturbation est due à la mesure mais reste indépendante de l'appareil de mesure. Ce comportement quantique est à la base des idées de « cryptographie quantique » : si le message est intercepté, cette interception est détectable par le récepteur.

Postulat 5 (Équation d'évolution) *L'évolution dans le temps de la fonction d'onde est régie par l'équation de Schrödinger (1) :*

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi = \mathscr{H}\,\Psi$$

où $\mathscr{H}$ est l'opérateur associé à l'énergie totale du système.

4.2 Exemple

Prenons l'exemple d'une particule dans un mouvement unidimensionnel et cherchons les vecteurs propres et valeurs propres de l'opérateur impulsion.

$$\vec{p} \Rightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} \qquad\qquad \text{ici } \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

Nous nous limitons ici à une dimension par souci de simplicité. D'abord, vérifions si l'opérateur est auto-adjoint :

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\hbar}{i}\Phi'\right)^* \Psi &= \frac{\hbar}{i}[\Phi^*\Psi]_{-\infty}^{+\infty} - \left(\frac{\hbar}{i}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Psi \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi^* \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\Psi
\end{aligned}$$

On peut maintenant chercher les valeurs propres de l'impulsion :

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f_u(x) &= u\, f_u(x) \\
f_u(x) &= K \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, ux\right)
\end{aligned}$$

On restreint alors l'espace fonctionnel aux fonctions tel que :

$$f_u(a) = f_u(-a) \quad \Rightarrow \quad u = \frac{n\hbar\pi}{a},\ n \in \mathbb{N}$$

Comme les fonctions propres sont des densités de probabilité, on « norme » f_u (ou plutôt f_n), ce qui permet de déterminer K :

$$f_n(x) = \frac{1}{2\sqrt{a}} \exp\left(i\, n\pi \frac{x}{a}\right)$$

On peut maintenant décomposer toute fonction d'onde sur la base de ces fonctions propres de l'opérateur impulsion, ce qui revient en fait à réaliser une décomposition en série de Fourier de la fonction d'onde, compte tenu de la forme des fonctions de la base.

4.3 Physique classique – Relations d'incertitude

4.3.1 Valeur moyenne

Soit Ψ une fonction d'onde et A une « observable » : un opérateur associé à une grandeur $\mathscr{A}$. Les valeurs propres $(a_n)_{n\in\mathbb{N}}$ de A sont les valeurs possibles de $\mathscr{A}$ et on peut décomposer Ψ dans la base des vecteurs propres de A. Cependant, le calcul de cette décomposition peut devenir relativement compliqué.

On définit alors la valeur moyenne de A par :

$$\langle A\rangle_\Psi = \sum_n a_n\, p(a_n) = \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \int \Psi^*\, A\, \Psi$$

En effet :

$$\begin{aligned}
\langle\Psi|A|\Psi\rangle &= \int \left(\sum_n c_n\varphi_n\right)^* A \left(\sum_m c_m\varphi_m\right) \\
&= \sum_{n,m} c_n c_m \int \varphi_n^* A\varphi_m \\
&= \sum_{n,m} c_n c_m a_m \int \varphi_n^* \varphi_m \\
&= \sum_n a_n c_n^2
\end{aligned}$$

Le moment d'ordre n de A s'écrit : $\langle A^n\rangle = \langle\Psi|A^n|\Psi\rangle$. Cette formule montre que Ψ contient toute l'information physique du système, puisque l'on peut calculer la valeur moyenne de toute grandeur physique à partir de la fonction d'onde. Il est bon aussi de préciser que cette valeur moyenne est calculée sur un grand nombre de systèmes identiques, non pas dans le temps. Cette formule suppose aussi que Ψ est normé.

L'évolution dans le temps de la valeur moyenne d'une observable (donc de ses valeurs macroscopiques) est un renseignement important sur le système.

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \langle\frac{\partial}{\partial t}\Psi|A|\Psi\rangle + \langle\Psi|\frac{\partial}{\partial t}A|\Psi\rangle + \langle\Psi|A|\frac{\partial}{\partial t}\Psi\rangle$$

Or, d'après le cinquième postulat, on peut exprimer les dérivés de Ψ par rapport au temps. Il vient alors :

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A,\mathscr{H}]\rangle \tag{3}$$

Dans le cas particulier où A ne dépend pas explicitement du temps et que A et $\mathscr{H}$ commutent, il vient que $\langle A\rangle$ est constant dans le temps. Par exemple, si $A = \mathscr{H}$ et $\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial t} = 0$, il vient $\langle E\rangle = \text{cste}$ et le système est conservatif. Si $\mathscr{H}$ est hermitique, on peut démontrer que : $\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi|\Psi\rangle = 0$, donc que la norme de Ψ est constante. En revanche, si $\mathscr{H}$ n'est pas auto-adjoint ($V\in\mathbb{C}$ par exemple, ce qui correspond à un cas d'absorption), $||\Psi||$ n'est plus constante : il y a disparition de particules.

4.3.2 Relation avec la physique classique

Description hamiltonienne de la mécanique classique On peut dire simplement qu'elle permet de faire disparaître les dérivées secondes des équations mais en doublant le nombre de variables et donc d'équations.

On note $(q_i)_i$ les degrés de liberté du système ((x, y, z) par exemple) et $(p_i)_i$ les moments associés ($(m\dot{x}, m\dot{y}, m\dot{z})$ par exemple). Les équations de la Mécanique deviennent, en notant $\mathscr{H}(p_i, q_i)$ l'Hamiltonien du système :

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_i} \tag{4}$$

Physique quantique Soit $F(z) = \sum_n c_n\, z^n$. Alors, si X et P sont les opérateurs position et impulsion, on a :

$$\begin{aligned} F(X, P) &= \sum_n c_n(X)\, P^n \qquad \text{si } X = X(P) \\ [X, P] = i\hbar \quad \text{et} \quad &[X, P^n] = i\hbar n P^{n-1} \end{aligned}$$

Alors :

$$\begin{aligned} [X, F(P)] &= \sum_n c_n [X, P^n] = \sum_n c_n\, i\hbar n P^{n-1} \\ &= i\hbar \frac{\partial F}{\partial P}(X, P) \end{aligned}$$

De même, si $P = P(X)$, $[P, F(X)] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial X}(X, P)$. Alors, en appliquant l'équation (3) aux (q_i) et (p_i), il vient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle q_i \rangle &= \left\langle \frac{\partial q_i}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [q_i, \mathscr{H}(q_i, p_i)] \rangle \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle p_i \rangle &= \left\langle \frac{\partial p_i}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle [p_i, \mathscr{H}(q_i, p_i)] \rangle \end{aligned}$$

Comme les (q_i) et (p_i) ne dépendent pas explicitement du temps, on en déduit les équations d'Ehrenfest (5).

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\langle q_i \rangle &= \left\langle \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial p_i} \right\rangle \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle p_i \rangle &= -\left\langle \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial q_i} \right\rangle \end{aligned} \right. \tag{5}$$

Les équations d'Ehrenfest (5) s'identifient formellement aux équations d'Hamilton (4) si l'on identifie les paramètres macroscopiques (q_i et p_i) aux valeurs moyennes des paramètres quantiques. La Mécanique classique est donc la mécanique des valeurs moyennes.

Exemple Reprenons l'exemple de la particule de masse m se déplaçant sur un axe (Ox). On a :

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \ ; \quad p = m\dot{x} \ ; \quad q = x$$

En appliquant les équations (5), il vient :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle x\rangle &= \left\langle \frac{p}{m}\right\rangle \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle p\rangle &= -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle\end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned}m\,\frac{\partial}{\partial t}\langle x\rangle &= \langle p\rangle \\ m\,\frac{\partial^2}{\partial t^2}\langle x\rangle &= -\left\langle \frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \langle f\rangle\end{aligned}$$

On retrouve l'équation classique de la dynamique.

4.3.3 Relations d'incertitude

La question est de savoir si l'on peut connaître simultanément deux grandeurs physiques A et B. Deux cas se présentent : soit les deux grandeurs sont dites incompatibles (les opérateurs associés ne commutent pas), soit elles sont compatibles (les opérateurs associés commutent).

Observables incompatibles Soit A et B deux opérateurs tels que :

$$[A, B] = i\hbar$$

On pose : $C = A + i\lambda B$, $\lambda \in \mathbb{R}$. C n'est pas hermitique ($C^* = A - i\lambda B$).

$$\begin{aligned}\|C\,\Psi\| &= \langle C\,\Psi|C\,\Psi\rangle \quad \geq 0 \\ &= \langle \Psi|C^* C\,\Psi\rangle \\ &= \langle A^2\rangle + i\lambda\langle [A,B]\rangle + \lambda^2\langle B^2\rangle \\ &= \langle A^2\rangle - \lambda\hbar + \lambda^2\langle B^2\rangle \quad \geq 0\end{aligned}$$

Ce trinôme en λ ne doit donc pas changer de signe, donc avoir un discriminant négatif : $\langle A^2\rangle\,\langle B^2\rangle \geq \hbar^2/4$. Si l'on note $\tilde{A} = A - \langle A\rangle$ et $\tilde{B} = B - \langle B\rangle$ les opérateurs « centrés », il vient de la même façon, puisque $[\tilde{A}, \tilde{B}] = [A, B] = i\hbar$:

$$\begin{aligned}\langle \tilde{A}^2\rangle\,\langle \tilde{B}^2\rangle &\geq \frac{\hbar^2}{4} \\ \Delta A^2 \cdot \Delta B^2 &\geq \frac{\hbar^2}{4} \\ \Delta A \cdot \Delta B &\geq \frac{\hbar}{2} \qquad (6)\end{aligned}$$

La relation (6) constitue la relation d'incertitude ou relation d'Heisenberg, souvent appelée à tort *principe* d'Heisenberg. Il ne s'agit en effet pas d'un principe, mais d'une conséquence de la Mécanique quantique.

Si deux opérateurs ne commutent pas, il existe une relation d'incertitude entre les grandeurs physiques associées, relation portant sur les écarts type. Cette relation d'incertitude n'a pas de rapport avec les erreurs expérimentales ; c'est une relation entre les distributions de probabilité.

Observables compatibles Pour que deux opérateurs commutent, il faut et il suffit qu'ils aient une base propre commune[6].

$$A\varphi_i = a_i\,\varphi_i \qquad \text{et} \qquad B\varphi_j = a_j\,\varphi_j$$

Alors, si A et B commutent ($[A,B]=0$), pour un état propre φ_i, la mesure de A est a_i et celle de B est b_i[7]. Par exemple, pour E et $\vec{p}$, si l'on connaît $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, alors on sait que $E = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$. En revanche, si l'on mesure $E = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$, on aura $\vec{p} = \pm\hbar\vec{k}$. Il y a dégénérescence.

Pour un système, on peut se demander quel est le nombre maximum d'informations que l'on peut connaître. On définit alors un *ensemble complet d'observables commutants* ou ECOC, qui est l'ensemble des opérateurs qui commutent deux à deux.

5 Évolution des systèmes

5.1 Décomposition dans la base des fonctions propres

On sait que :

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi &= \mathscr{H}\,\Psi \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle A\rangle &= \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A,\mathscr{H}]\rangle \end{aligned}$$

Si $\mathscr{H}$ est indépendant du temps, le problème s'écrit alors, en utilisant la notation *bracket* :

$$\mathscr{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

Alors, en décomposant la fonction d'onde sur la base des fonctions propres, il vient :

$$\begin{aligned} \Psi(t) &= \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\Psi(t)\rangle \\ &= \sum_n c_n(t)\,|\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

Ensuite, si l'on remplace dans l'équation (1), il vient :

$$i\hbar\sum_n \frac{\partial}{\partial t}c_n(t)\varphi_n = \sum_n c_n(t)\,\mathscr{H}\varphi_n$$

En projetant cette équation sur la base des $(\varphi_j)_j$, on écrit, pour tout $j \in \mathbb{N}$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_j(t) = E_j\,c_j(t)$$

Avec ces équations, on détermine l'ensemble des coefficients $(c_j)_j$. Finalement, la fonction d'onde Ψ s'écrit :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(0)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)\,|\varphi_n\rangle$$

Cette équation donne l'évolution de l'état au cours du temps.

[6] La démonstration (facile) est laissée au lecteur.
[7] Il s'agit en fait d'une bijection.

5.2 Application à une superposition d'états

Si à $t = 0$, un système est dans une superposition d'état :

$$|\Psi(0)\rangle = a_i|\varphi_i\rangle + a_j|\varphi_j\rangle \qquad \text{avec } |a_i|^2 + |a_j|^2 = 1$$

alors, on a immédiatement :

$$|\Psi(t)\rangle = a_i \exp\left(-i\frac{E_i}{\hbar}t\right)|\varphi_i\rangle + a_j \exp\left(-i\frac{E_j}{\hbar}t\right)|\varphi_j\rangle$$

Si A est une observable,

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \langle\Psi|A|\Psi\rangle \\ &= |a_i|^2\langle\varphi_i|A|\varphi_i\rangle + |a_j|^2\langle\varphi_j|A|\varphi_j\rangle \\ &\quad +2\,\Re\left(a_i a_j^* \exp\left(-i\frac{E_i - E_j}{\hbar}t\right)\right)\langle\varphi_j|A|\varphi_i\rangle\end{aligned}$$

Les valeurs moyennes dépendent donc du temps. De plus, toutes les observables ont une dépendance temporelle harmonique à la pulsation ω dite pulsation de Bohr :

$$\omega = \frac{E_i - E_j}{\hbar}$$

Donc, si les conditions initiales sont une combinaison linéaire d'états, le système ne possède pas une énergie bien définie. La position moyenne (par exemple, ou l'énergie moyenne) du système va osciller.

6 Spin – Statistiques

6.1 Expérience de Stern & Gerlach

Soit une particule animée d'un mouvement circulaire uniforme dans un champ magnétique perpendiculaire au plan du mouvement. Son moment cinétique s'écrit : $\overrightarrow{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$. Le moment magnétique $\vec{\mu}$ de la particule s'exprime alors : $\vec{\mu} = -\frac{e}{2m}\overrightarrow{L}$. Plus généralement, on a la relation : $\vec{\mu} = \gamma\overrightarrow{L}$ avec γ le rapport gyromagnétique. Le moment cinétique est donc associé à un moment magnétique.

L'expérience de Stern & Gerlach (cf. figure 6) consiste à faire traverser un jet d'électrons dans un espace présentant un gradient de champ magnétique et d'observer les différentes trajectoires obtenues.

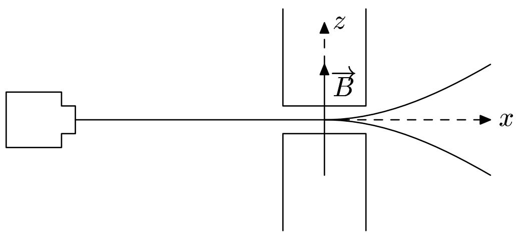


FIG. 6 – Expérience de Stern & Gerlach

La force s'exerçant sur la particule tend à aligner le moment magnétique $\vec{\mu}$ de la particule avec le champ $\overrightarrow{B}$. Compte tenu de la forme de $\overrightarrow{B} = B\vec{z}$, cette force s'écrit :

$$F_z = \frac{\partial B_z}{\partial z} \mu \cos\theta$$

si θ est l'angle entre $\vec{\mu}$ et l'axe z. La force est donc proportionnelle à la projection de $\vec{\mu}$ sur $\vec{z}$. Comme $\vec{\mu} = \gamma \overrightarrow{L}$ et que la projection de $\overrightarrow{L}$ sur z est quantifiée : $L_z = l\hbar,\ l \in \mathbb{N}$, on doit obtenir $2l+1$ trajectoires différentes, correspondant à toutes les valeurs possibles appartenant $[-l; +l]$. Or, on observe seulement deux taches, soit $l = \frac{1}{2}$, ce qui est impossible dans le cadre du moment cinétique orbital.

Cette expérience met en évidence une nouvelle variable : le *spin* de l'électron. Le *spin* est l'analogue de la polarisation pour le photon. En revanche, il n'a rien à voir avec une rotation de l'électron sur lui-même car sinon, on obtiendrait trois taches dans l'expérience de Stern & Gerlach. On doit ajouter un postulat pour tenir compte du *spin*.

Postulat 6 (Opérateur de *spin*) *L'opérateur de* spin *est un opérateur angulaire qui n'a pas d'analogue classique :*

$$\overrightarrow{S} = \left| \begin{array}{l} S_x \\ S_y \\ S_z \end{array} \right.$$

Les relations de commutation s'écrivent, avec toutes les permutations circulaires possibles :

$$[S_x,\ S_y] = i\hbar S_z$$

Postulat 7 (Particules de *spin* $\frac{1}{2}$) *Les particules de* spin $\frac{1}{2}$ *sont décrites par un* spineur *de dimension 2 :*

$$\begin{bmatrix} \Psi^+ \\ \Psi^- \end{bmatrix}$$

On est obligé de décrire la particule avec deux fonctions d'onde, l'une pour la probabilité de présence de la particule avec le *spin* « en haut » et l'autre avec le *spin* « en bas ». On a de plus $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ avec :

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

S_z est donc diagonal : les deux vecteurs de base sont les vecteurs propres de S_z. Le premier vecteur de base correspond au *spin* en haut et le second au *spin* en bas. Il vient alors :

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

avec $\frac{3}{4} = l(l+1)$. Les particules ont un pseudo-moment cinétique demi-entier. Les moments cinétiques classiques sont des multiples entiers de $\hbar$.

La plupart du temps, l'opérateur Hamiltonien se décompose en une somme de deux opérateurs, l'un dans l'espace réel et l'autre dans l'espace de *spin*.

Remarque : dans une théorie relativiste, l'existence du *spin* apparaît directement.

6.2 Particules identiques

Lorsque l'on réalise une expérience d'interaction entre deux particules identiques, la Mécanique Quantique ne nous permet pas de suivre les particules et les distinguer après collision. Nous allons étudier le problème de *l'indicernabilité*. Donc, si P_{12} est l'opérateur d'échange des deux particules :

$$P_{12}\,\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \Psi(\vec{r}_2,\vec{r}_1)$$

Cet opérateur a deux familles de fonctions propres : les fonctions symétriques et antisymétriques, et deux valeurs propres : ± 1. De plus, le résultat de l'expérience ne dépend pas du choix de la particule :

$$|\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)|^2 = |P_{12}\,\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)|^2$$

On en déduit : $P_{12}\,\Psi = \mathrm{e}^{i\delta}\Psi$ et P_{12}^2 est l'opérateur identité. Donc Ψ est symétrique ou antisymétrique.

Postulat 8 *Toutes les particules physiques appartiennent à l'une des deux catégories suivantes :*
- *les bosons (Ψ est symétrique pour deux particules identiques, le* spin *est entier) ;*
- *les fermions (Ψ est antisymétrique pour deux particules identiques, le* spin *est demi-entier).*

Par exemple, les photons sont des bosons et les électrons sont des fermions.

Si l'on considère deux particules sans interaction, $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 + \mathscr{H}_2$ avec $H\varphi_i = E_i\varphi_i$. Alors, $\varphi_{ij}(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2)$. Cependant, il faut que ce soit indépendant du choix. Il faut donc symétriser :
- pour les bosons, $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2) + \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_j(\vec{r}_1))$
- pour les fermions, $\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2) = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_i(\vec{r}_1)\varphi_j(\vec{r}_2) - \varphi_i(\vec{r}_2)\varphi_j(\vec{r}_1))$

Si $i = j$, on retrouve le principe d'exclusion de Pauli pour les fermions ($\Psi = 0$). Ce résultat explique que la matière ne s'effondre pas : on ne peut pas mettre deux fermions au même point.

7 Applications

7.1 L'oscillateur harmonique à une dimension

7.1.1 Généralités

L'oscillateur harmonique revêt une grande importance en physique car de nombreux systèmes se comportent de cette façon, au moins de façon approchée. En effet, tout système soumis à un potentiel présentant un minimum pourra être considéré, autour de sa position d'équilibre x_0 et de manière approchée comme un oscillateur harmonique (cf. figure 7). En effet, on pourra toujours écrire au voisinage de x_0 :

$$V(x) = V(x_0) + k\,(x - x_0)^2 + \mathrm{O}((x - x_0)^3)$$

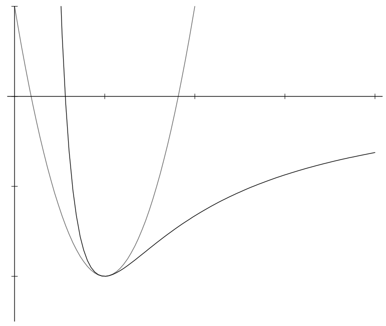


FIG. 7 – Potentiel présentant un minimum et approximation parabolique

le terme d'ordre 1 du développement de Taylor étant nul puisque en x_0, V est extremum. On sait de plus que $k = \frac{1}{2}V''(x_0)$ est positif puisque V admet un minimum.

Soit une masse m soumise à un potentiel V ne dépendant que de x et de la forme : $V(x) = \frac{1}{2}k\,x^2$ avec $k \geq 0$. Cette masse est soumise à une force de rappel tendant à l'attirer vers la position $x = 0$, position d'équilibre stable (minimum pour V). On sait en outre qu'en Mécanique Classique, le mouvement selon l'axe $(O\vec{x})$ est un mouvement sinusoïdal autour du point O, de pulsation ω :

$$x = x_m \cos(\omega t + \varphi) \qquad \text{avec } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

7.1.2 Traitement quantique

L'Hamiltonien d'un tel système s'écrit :

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}\,m\omega^2 x^2$$

et la fonction d'onde vérifiant l'équation aux valeurs propres : $\mathscr{H}\varphi = E\varphi$ peut s'écrire :

$$\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{-Et/\hbar}\,\varphi(x)$$

Notons :

$$Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,X \qquad \text{et} \qquad P = \sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\,P$$

Il vient alors : $[Q,P] = \frac{1}{\hbar}[X,P] = i$ et :

$$\mathscr{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(P^2 + Q^2) = \hbar\omega\,\tilde{\mathscr{H}}$$

Pour faciliter la recherche des valeurs propres de $\tilde{\mathscr{H}}$ et donc de $\mathscr{H}$, il est pratique de poser l'opérateur a[8] :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \qquad ; \qquad a^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP)$$

[8] Il est d'usage d'écrire cet opérateur en minuscule contrairement aux autres opérateurs.

Il vient alors : $[a, a^*] = \frac{1}{2}[Q + iP, Q - iP] = 1$. De même, en notant $N = a^* a$, on montre que :

$$
\begin{aligned}
[N, a] &= [a^* a, a] = -[a, a^* a] \\
&= -a[a, a^*] - a^*[a, a] \\
&= -a \\
\text{et} \quad [N, a^*] &= -[a^*, a^* a] \\
&= -a[a^*, a^*] - a^*[a^*, a] \\
&= a^*
\end{aligned}
$$

Il est aussi intéressant de développer N :

$$
\begin{aligned}
a\, a^* &= \frac{1}{2}(Q + iP)(Q - iP) \\
&= \frac{1}{2}(Q^2 + P^2) + \frac{i}{2}[P, Q] \\
&= \tilde{\mathscr{H}} - \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

On en déduit : $\tilde{\mathscr{H}} = N + \frac{1}{2}$. Pour déterminer le spectre de $\tilde{\mathscr{H}}$, on détermine le spectre de N, soit en notation *bracket* : $N|n\rangle = n\,|n\rangle$. Or, si l'on écrit :

$$
\begin{aligned}
N(a|n\rangle) &= a^* a\, a|n\rangle = (-1 + aa^*)\, a|n\rangle \\
&= -a|n\rangle + aN\,|n\rangle = (n-1)\, a|n\rangle
\end{aligned}
$$

il vient que $a|n\rangle$ est vecteur propre de N associé à la valeur propre $n-1$, donc colinéaire à $|n-1\rangle$:

$$a|n\rangle = x_n\,|n-1\rangle$$

C'est pour cette raison que l'on nomme l'opérateur a l'opérateur *annihilation*, puisqu'il transforme un vecteur propre associé à la valeur propre n en un autre associé à $n-1$. Pour déterminer x_n, il suffit de remarquer que :

$$\langle n|a^* a|n\rangle = |x_n^2| = n$$

puisque l'observable N prend pour valeur n. il vient donc : $x_n = \sqrt{n}$.

On pourra écrire de la même façon :

$$N(a^*|n\rangle) = (n+1)\, a^*|n\rangle$$

soit encore :

$$a^*|n\rangle = y_n\,|n+1\rangle$$

et l'on appellera l'opérateur a^* l'opérateur *création*, puisqu'il transforme un vecteur propre associé à la valeur propre n en un autre associé à $n+1$. On montrera comme précédemment que $y_n = \sqrt{n+1}$.

Ensuite, considérons la norme de $a|n\rangle$. On a : $||a|n\rangle||^2 \geq 0$. Or,

$$||a|n\rangle||^2 = \langle n|a^* a|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n$$

On en déduit donc que les valeurs propres n de N sont positives ou nulles. Ensuite, si l'on écrit n en partie entière et fractionnaire : $n = i + \alpha$, $i \in \mathbb{N}$ et $0 < \alpha < 1$, on peut écrire en faisant agir i fois l'opérateur a sur n :

$$a^i|n\rangle = \sqrt{(n-1)(n-2)\cdots(\alpha+1)}\,|\alpha\rangle$$

On sait aussi que : $a|\alpha\rangle = \lambda|\alpha-1\rangle$ avec $\alpha-1<0$. On a donc construit de proche en proche une valeur propre strictement négative de N associée à un vecteur propre non nul $(a^{i+1}|n\rangle)$, ce qui est impossible. Les valeurs propres de N sont donc des entiers strictement positifs. On a aussi construit un vecteur propre associé à la valeur propre 0 : $a|0\rangle = 0$. On peut alors montrer, par application successive de l'opérateur a^* que le spectre de N est l'ensemble $\mathbb{N}^{+*}$ des entiers strictement positifs.

Finalement, comme $\mathscr{H} = \hbar\omega(N+\frac{1}{2})$, il vient que :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

En Mécanique Quantique, *l'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée* (cf. figure 8). Ensuite, tous les état sont espacés d'une valeur constante : $\hbar\omega$. Enfin, on peut remarquer que l'énergie du niveau fondamental (d'énergie minimum) n'est pas nulle mais vaut $\frac{\hbar\omega}{2}$.

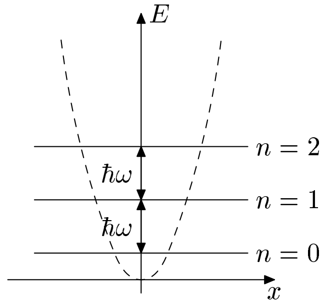


FIG. 8 – Niveaux d'énergie de l'oscillateur harmonique

Pour terminer, à partir de l'équation $a|0\rangle = 0$, on peut déterminer l'ensemble des vecteurs propres de H :

$$a|0\rangle = 0$$
$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x + i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\,\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\varphi_0(x) = 0$$
$$\frac{m\omega}{\hbar}x\,\varphi_0(x) + \varphi_0'(x) = 0$$
$$\varphi_0(x) = C_0\,\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

Grâce à la relation $a^*|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$, on peut calculer de proche en proche les fonctions propres (φ_n) à partir de φ_0. Par exemple (cf. figure 9) :

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= C_1\,x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\\ \varphi_2(x) &= C_2\,(2x^2-1)\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\end{aligned}$$

En réalité, on pourra remarquer que les fonctions propres sont de la forme : $\varphi_n = H_n\,\varphi_0$ où H_n est le polynôme d'Hermite d'ordre n. On remarque aussi que même si le potentiel $V(x)$ est pair, cela n'implique pas que Ψ est pair. En effet, seul $|\Psi|^2$ a une signification physique et respecte les symétries du système. Ψ sera donc pair ou impair, par l'intermédiaire du polynôme en facteur. Enfin,

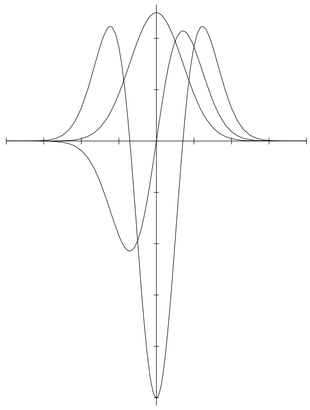


FIG. 9 – Fonctions propres de l'oscillateur harmonique

on remarquera que le nombre n correspond au nombre de noeuds de la fonction propre φ_n et que, quand n augmente, φ_n « s'étale » plus (l'écart type augmente), *i.e.* que l'élongation du ressort devient plus importante.

7.2 Système à deux états

7.2.1 Généralités

Les systèmes à deux états ou deux niveaux sont importants car ils constituent souvent une approximation commode pour l'étude de systèmes plus complexes. Cette étude simplifiée permet de dégager néanmoins un modèle mathématique simple permettant d'expliquer des phénomènes physiques généraux et importants (résonance quantique, oscillation entre deux états, etc.)

Considérons par exemple l'atome d'hydrogène ionisé H_2^+ : un électron est délocalisé entre les deux protons plus lourds. On peut alors considérer que la liaison chimique est une combinaison des deux états où les protons sont à l'infini et l'électron lié à l'un ou l'autre des protons. On trouvera aussi comme exemple la molécule d'ammoniac NH_3 qui possède deux états irréductibles indépendants selon l'orientation du moment dipolaire de la molécule.

7.2.2 Traitement quantique : aspect statique

Soit $\mathscr{H}_0$ l'Hamiltonien du système sans interaction :

$$\mathscr{H}_0|\varphi_1\rangle = E_1\,|\varphi_1\rangle, \qquad \mathscr{H}_0|\varphi_2\rangle = E_2\,|\varphi_2\rangle \qquad \text{et} \qquad \langle\varphi_1|\varphi_2\rangle = 0$$

$|\varphi_1\rangle$ et $|\varphi_2\rangle$ sont les deux états du système. Dans la base formée par ces deux états, l'Hamiltonien est diagonal :

$$\mathscr{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$$

Si on introduit un terme de couplage entre les états, l'Hamiltonien devient :

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + W \quad = \quad \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned}\mathscr{H}|\Psi_+\rangle &= E_+\,|\Psi_+\rangle \\ \mathscr{H}|\Psi_-\rangle &= E_-\,|\Psi_-\rangle\end{aligned}$$

avec $W_{12} = W_{21}^* = |W_{12}|\mathrm{e}^{i\varphi}$. En notant $\tilde{E}_1 = E_1 + W_{11}$ et $\tilde{E}_2 = E_2 + W_{22}$, les valeurs propres $E_\pm$ de $\mathscr{H}$ s'écrivent :

$$E_\pm = \frac{1}{2}(\tilde{E}_1 + \tilde{E}_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2)^2 + 4|W_{12}|^2}$$

Les vecteurs propres $\Psi_\pm$ associés s'écrivent quant à eux, en définissant l'angle θ comme suit :

$$\begin{aligned}\tan\theta &= \frac{2|W_{12}|}{\tilde{E}_1 - \tilde{E}_2} \\ |\Psi_+\rangle &= \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\varphi_2\rangle \\ |\Psi_-\rangle &= -\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\varphi_2\rangle\end{aligned}$$

Pour simplifier la discussion, nous allons considérer W purement diagonal. Ceci ne restreint pas la généralité, puisqu'il suffit de remplacer dans ce qui suit E_1 et E_2 par $\tilde{E}_1$ et $\tilde{E}_2$. En posant :

$$\begin{aligned}\Delta &= \tilde{E}_1 - \tilde{E}_2 = E_1 - E_2 \\ E_m &= \frac{1}{2}(\tilde{E}_1 + \tilde{E}_2) = \frac{1}{2}(E_1 + E_2)\end{aligned}$$

on peut représenter graphiquement l'effet du couplage entre états (cf. figure 10). Si $\Delta = 0$ et $E_m = E_1 = E_2$ (état où l'énergie est doublement dégénérée), la dégénérescence est levée par $2|W_{12}|$ à cause de l'interaction. Cette levée de dégénérescence augmente avec l'interaction : si deux états sont en interaction, leurs énergies vont « se repousser » (leurs différences vont augmenter).

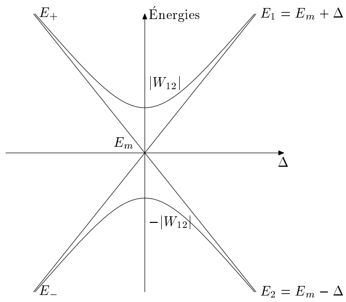


FIG. 10 – Variation de E_+ et E_- en fonction de Δ

On remarque aussi qu'un état a toujours une énergie plus faible que l'autre, ce qui correspond respectivement à un état liant et un non-liant, quelque soit le type d'interaction. On parle de phénomène de *résonance quantique*.

Si $\Delta = 0$, ce qui correspond à un fort couplage, l'expression des fonctions d'onde devient :

$$\begin{aligned}|\Psi_+\rangle &= \frac{\sqrt{2}}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\varphi_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\varphi_2\rangle \\ |\Psi_-\rangle &= -\frac{\sqrt{2}}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}\,|\varphi_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\varphi_2\rangle\end{aligned}$$

Au contraire, si $\Delta \gg 1$, Ψ_+ et Ψ_- sont très proches de φ_1 et φ_2. De façon plus générale, on peut considérer φ_1 et φ_2 comme les vecteurs propres de l'opérateur « position ». Alors, lorsque l'on se trouve dans l'un des états propres de l'Hamiltonien avec interaction, on n'est plus capable de connaître la position.

7.2.3 Traitement quantique : aspect dynamique

Que deviennent les considérations précédentes si l'on fait maintenant intervenir le temps ? Comme φ_1 et φ_2 sont indépendants du temps ($\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial t} = 0$), il parait normal de chercher $\Psi(t)$ vérifiant l'équation de Schrödinger (1) sous la forme :

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \lambda_1(t)\,|\varphi_1\rangle + \lambda_2(t)\,|\varphi_2\rangle \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle &= \mathscr{H}|\Psi\rangle \end{aligned}$$

L'inconvénient de cette expression de Ψ est que l'équation (1) va donner des équations couplées. Il est donc plus intéressant d'écrire cette équation dans la base (Ψ_+, Ψ_-) où $\mathscr{H}$ est diagonal. L'équation de Schrödinger donne alors immédiatement :

$$\left\{ \begin{aligned} \lambda_1(t) &= \lambda_1(0)\,\exp\left(-i\,\tfrac{E_+}{\hbar}t\right) \\ \lambda_2(t) &= \lambda_2(0)\,\exp\left(-i\,\tfrac{E_-}{\hbar}t\right) \end{aligned} \right.$$

Alors, si à $t = 0$, on a $\Psi(0) = \varphi_1$ et que l'on cherche la probabilité $\mathscr{P}_{12}(t)$ d'être dans l'état φ_2 au cours du temps, il suffit de calculer :

$$\mathscr{P}_{12}(t) = |\langle\varphi_2|\Psi(t)\rangle|^2$$

Le seul problème est que l'on connaît $\Psi(t)$ dans la base (Ψ_+, Ψ_-) et non dans (φ_1, φ_2). Il faut donc exprimer φ_2 dans la base (Ψ_+, Ψ_-).

D'abord, terminons d'exprimer $\Psi(t)$ maintenant que les conditions initiales ont été fixées :

$$\left\{ \begin{aligned} \lambda_1(0) &= \langle\varphi_1|\Psi_+\rangle = \tfrac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{e}^{-i\varphi/2} \\ \lambda_2(0) &= \langle\varphi_1|\Psi_-\rangle = -\tfrac{\sqrt{2}}{2}\mathrm{e}^{-i\varphi/2} \end{aligned} \right.$$

soit :

$$|\Psi(t)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\frac{E_+}{\hbar}t}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\Psi_+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\frac{E_-}{\hbar}t}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\Psi_-\rangle$$

De plus, on peut écrire :

$$\begin{aligned} |\varphi_2\rangle &= \langle\varphi_2|\Psi_+\rangle\,|\Psi_+\rangle + \langle\varphi_2|\Psi_-\rangle\,|\Psi_-\rangle \\ &= \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\Psi_+\rangle + \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}\,|\Psi_-\rangle \end{aligned}$$

soit :

$$\langle\varphi_2|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{i\varphi}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\left(\mathrm{e}^{-i\frac{E_+}{\hbar}t} - \mathrm{e}^{-i\frac{E_-}{\hbar}t}\right)$$

et finalement, on trouve l'expression de $\mathscr{P}_{12}(t)$, la deuxième étant parfois désignée sous le nom de formule de Rabi (cf. figure 11) :

$$\begin{aligned} \mathscr{P}_{12}(t) &= \sin^2\theta\,\sin^2\left(\frac{E_+ - E_-}{2\hbar}t\right) \\ &= \frac{4|W_{12}|^2}{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}\,\sin^2\left(\sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2}\,\frac{t}{2\hbar}\right) \end{aligned}$$

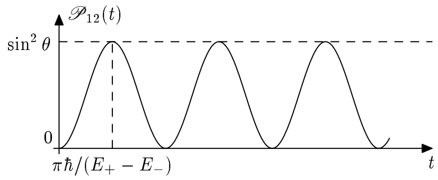


FIG. 11 – Variation de $\mathscr{P}_{12}(t)$ en fonction du temps

La formule de Rabi devient, si $E_1 = E_2$:

$$\mathscr{P}_{12}(t) = \sin^2\left(\frac{|W_{12}|}{\hbar}t\right)$$

On voit ainsi, sur la formule précédente, que tout couplage entre deux états de même énergie fait osciller le système d'un état à l'autre avec une fréquence proportionnelle au couplage. En revanche, si $E_1 - E_2$ croît, $(E_+ - E_-)/\hbar$ augmente et $\sin^2\theta$ diminue. En effet, pour un couplage faible ($E_1 - E_2 \gg |W_{12}|$), les énergies avec interaction sont peu différentes des énergies sans interaction et l'état $|\Psi_+\rangle$ est très proche de l'état initial $|\varphi_1\rangle$: il y aura donc très peu d'évolution du système au cours du temps à partir de l'état initial.

8 Méthode d'approximation

8.1 Généralités

Il existe en Physique de nombreux problèmes que l'on ne sait pas résoudre analytiquement : le problème des trois corps, certains écoulements turbulents par exemple. On utilise alors des méthodes d'approximation, comme la théorie de la couche limite en Mécanique des Fluides ou la théorie des champs proches en Dynamique des Structures. En Mécanique Quantique, on peut utiliser en particulier *la méthode des perturbations stationnaires.*

Pour illustrer le propos, prenons l'exemple de l'atome d'Hélium : il est composé d'un proton et de deux électrons. Soit $\mathscr{H}$ son Hamiltonien. On peut chercher à savoir si l'on connaît un problème voisin soluble, d'Hamiltonien $\mathscr{H}_0$, ce qui revient à écrire :

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + W$$

Par exemple, on pourrait écrire, dans le cas de l'atome d'Hélium, $\mathscr{H}_0$ comme l'énergie cinétique d'interaction proton-électron et W comme l'énergie de répulsion des deux électrons. On appellera $\mathscr{H}_0$ *Hamiltonien non-perturbé* et W *la perturbation.* Si, comme nous l'envisagerons ici, W ne dépend pas du temps, on a alors affaire à une *perturbation stationnaire.* On cherche donc à évaluer les modifications dues à W des niveaux d'énergie et des états stationnaires du système non-perturbé.

Pour cela, nous allons faire l'hypothèse que W est petit devant $\mathscr{H}_0$: il faut comprendre que les éléments de la matrice de W sont petits devant ceux de $\mathscr{H}_0$. Cela peut s'écrire :

$$W = \lambda\,\widehat{W} \qquad \text{avec } \lambda \ll 1$$

où λ est un paramètre sans dimension et $\widehat{W}$ est comparable à $\mathscr{H}_0$. La théorie des perturbations stationnaires va consister à développer les valeurs propres et les niveaux d'énergie de $\mathscr{H}$ selon les puissances de λ à un ordre fini seulement (souvent un ou deux).

Si l'on suppose que « $\mathscr{H}_0$ » est un problème soluble, on connaît les valeurs et vecteurs propres de $\mathscr{H}_0$:

$$\mathscr{H}_0|\varphi_p^i\rangle = E_p^0\,|\varphi_p^i\rangle$$

où l'indice p repère les valeurs propres du système non-perturbé et l'indice i le degré de dégénérescence (dimension du sous-espace propre associé à la valeur propre). Les valeurs et vecteurs propres du système perturbé vont dépendre de λ. L'allure des variations des valeurs propres en fonction de λ sont représentées sur la figure 12. Il est notamment possible que la perturbation lève la dégénérescence (ou non, comme dans le cas de la valeur propre E_4^0, représenté par un trait double), voire crée des dégénérescences accidentelles (en λ_1 par exemple). Ces cas ne sont pas à envisager lorsque $\lambda \ll 1$ puisque, alors, les états perturbés sont très proches des états non-perturbés.

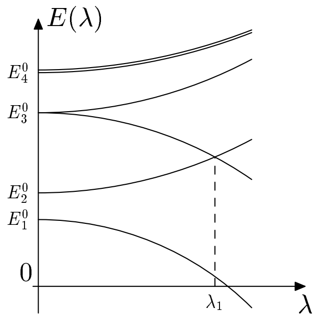


FIG. 12 – Allure de l'évolution des niveaux d'énergie en fonction de λ

8.2 Résolution approchée du problème spectral

On considère maintenant que le problème spectral perturbé $\mathscr{H}(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle$ n'est pas soluble exactement. On fait un développement en puissances de λ :

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \varepsilon_0 + \lambda\,\varepsilon_1 + \lambda^2\,\varepsilon_2 + \cdots \\ |\psi(\lambda)\rangle &= |0\rangle + \lambda\,|1\rangle + \lambda^2\,|2\rangle + \cdots \end{aligned}$$

Si l'on reporte ces expressions dans l'équation spectrale et que l'on isole les termes suivants les puissances croissantes de λ, on trouve les équations suivantes en se limitant à l'ordre 2 :

$$(\mathscr{H}_0 - \varepsilon_0)|0\rangle = 0 \quad (7)$$

$$(\mathscr{H}_0 - \varepsilon_0)|1\rangle + (\widehat{W} - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \quad (8)$$

Un vecteur propre est toujours défini par l'équation spectrale à un facteur près. Nous choisirons donc les vecteurs propres normés tels que $\langle 0|\Psi\rangle$ soit réel. A l'ordre 0, ceci implique que le vecteur $|0\rangle$ soit normé, ce qui ne fixe pas sa phase :

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad (9)$$

À l'ordre 1, $|\Psi|^2$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle &= [\langle 0| + \lambda\,\langle 1|][|0\rangle + \lambda\,|1\rangle] + \mathrm{O}(\lambda^2) \\ &= \langle 0|0\rangle + \lambda\,[\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle] + \mathrm{O}(\lambda^2)\end{aligned}$$

Cette dernière expression est égale à 1 au premier ordre si le terme en λ est nul. Alors, le choix de la phase impose, puisque $\lambda \in \mathbb{R}$:

$$\langle 1|0\rangle = \langle 0|1\rangle = 0 \tag{10}$$

Considérons maintenant un niveau E_n^0 non-dégénéré de l'Hamiltonien non-perturbé $\mathscr{H}_0$, associé à un vecteur propre normé $|\varphi_n\rangle$ unique à une phase près. On doit avoir $E(\lambda) \longrightarrow E_0^n$ lorsque λ tend vers zéro. Il vient donc que $\varepsilon_0 = E_n^0$. Cela entraîne que $|\varphi_n\rangle$ et $|0\rangle$ soient proportionnels. Comme $|\varphi_n\rangle$ est normé, nous choisirons :

$$|0\rangle = |\varphi_n\rangle$$

On retrouve ainsi l'état non-perturbé lorsque $\lambda \longrightarrow 0$. On appelle $E_n(\lambda)$ la valeur propre de $\mathscr{H}$ qui tend vers E_n^0 lorsque $\lambda \longrightarrow 0$. Nous supposerons que λ reste suffisamment petit pour que ce niveau d'énergie reste non-dégénéré, *i.e.* pour qu'il lui corresponde un unique vecteur propre $|\Psi_n(\lambda)\rangle$.

En projetant l'équation (8) sur $|\varphi_n\rangle$, il vient :

$$\langle\varphi_n|\mathscr{H}_0 - \varepsilon_0|1\rangle + \langle\varphi_n|\widehat{W} - \varepsilon_1|0\rangle = 0$$

Le premier terme est nul puisque $|\varphi_n\rangle = |0\rangle$ est vecteur propre de $\mathscr{H}_0$ associé à la valeur propre $E_n^0 = \varepsilon_0$. On a donc :

$$\varepsilon_1 = \langle\varphi_n|\widehat{W}|0\rangle = \langle\varphi_n|\widehat{W}|\varphi_n\rangle$$

L'énergie perturbée du niveau n s'écrit finalement au premier ordre en $W = \lambda\,\widehat{W}$:

$$E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle\varphi_n|W|\varphi_n\rangle + \mathrm{O}(\lambda^2)$$

La correction au premier ordre à une énergie non-dégénérée E_n^0 est simplement égale à la valeur moyenne du terme de perturbation W calculée sur l'état non-perturbé $|\varphi_n\rangle$.

Pour déterminer la correction au vecteur propre, on doit projeter l'équation (8) sur l'ensemble des $(|\varphi_p^i\rangle)_{p,i}$ autres que $|\varphi_n\rangle$. On écrit alors :

$$\langle\varphi_p^i|\mathscr{H}_0 - \varepsilon_0|1\rangle + \langle\varphi_p^i|\widehat{W} - \varepsilon_1|\varphi_n\rangle = 0 \qquad (p \neq n)$$

Nous pouvons déjà éliminer, par orthogonalité des vecteurs propres, le terme $\langle\varphi_p^i|\varepsilon_1|\varphi_n\rangle$. D'autre part, en faisant agir à gauche $\mathscr{H}_0$ sur $|\varphi_p^i\rangle$ dans le premier terme, il vient :

$$(E_p^0 - E_n^0)\langle\varphi_p^i|1\rangle + \langle\varphi_p^i|\widehat{W}|\varphi_n\rangle = 0$$

On obtient finalement les composantes de $|1\rangle$ dans la base des $(|\varphi_p^i\rangle)$ des états non perturbés, sauf pour $p = n$. Or, on a, d'après la condition (10), puisque $|\varphi_n\rangle = |0\rangle$: $\langle\varphi_n|1\rangle = 0$. D'où :

$$|1\rangle = \sum_{p\neq n}\sum_i \frac{\langle\varphi_p^i|\widehat{W}|\varphi_n\rangle}{E_n^0 - E_p^0}|\varphi_p^i\rangle$$

Finalement, au premier ordre en $W = \lambda \widehat{W}$, le vecteur propre $|\Psi_n(\lambda)\rangle$ de $\mathscr{H}$ qui correspond à l'état non perturbé $|\varphi_n\rangle$ s'écrit :

$$|\Psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | \widehat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + \mathrm{O}(\lambda^2)$$

La correction du premier ordre au vecteur d'état est donc une combinaison linéaire de tous les états autre que $|\varphi_n\rangle$: on parle de *contamination* de l'état $|\varphi_n\rangle$ par les autres états propres de $\mathscr{H}_0$. Il est cependant bon de noter que la contamination est d'autant plus importante que le couplage induit par W entre $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_p^i\rangle$ (donné par l'élément de matrice $\langle \varphi_p^i | \widehat{W} | \varphi_n \rangle$) est plus fort et que le niveau E_p^0 est proche du niveau E_n^0 étudié.

Remarque : nous avons fait l'hypothèse que la perturbation W était « petite » devant l'Hamiltonien non-perturbé, *i.e.* que les éléments de la matrice de W sont petits devant ceux de $\mathscr{H}_0$. En réalité, cette hypothèse ne suffit pas. Il faut en réalité, pour que la correction du premier ordre soit faible, que *les éléments non-diagonaux de W soient petits devant les différences d'énergies non-perturbées correspondantes.*

« [...] Je crois pouvoir vous dire à coup sûr que personne ne comprend la Mécanique Quantique... (Je vous ai) raconté comment la nature se comporte. Si vous voulez bien admettre qu'elle se comporte ainsi, vous la trouverez adorable et charmante. Si vous pouvez l'évitez, ne restez pas là à vous répéter "mais comment peut-il en être ainsi ?", car vous serez submergés, noyés et entraînés dans un cul de sac dont personne n'a encore jamais réussi à s'échapper. Personne ne sait comment cela peut se passer ainsi. »

Richard Feynman, *La nature des lois physiques.*

Table des matières

Table des figures

Références

[1] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu et Franck Laloe – *Mécanique quantique* – Hermann, 1973 (2 tomes).

[2] Jean-Marc Levy-Leblond et Françoise Balibar – *Quantique* – InterÉditions, 1984.