



# COURS DE MECANIQUE QUANTIQUE L2 PC

**Dr. KEZO PONAHO C**

**UFR. Environnement, UJLoG Daloa**

**Laboratoire des Sciences et Technologie de L'Environnement**

**[ponaho04@yahoo.fr](mailto:ponaho04@yahoo.fr)**

# CONTENU DU COURS

## ECUE1

- Chapitre 1 : Les fondements de la mécanique quantique
- Chapitre 2 : Résolution de l'équation de Schrödinger

## ECUE 2

- Chapitre 3 : Les outils mathématiques de la mécanique quantique
- Chapitre 4 : Les postulats de la mécanique quantique
- Chapitre 5 : L'oscillateur harmonique

# ECUE 1

# CHAP1. Les fondements de la Mécanique Quantique

- Jusqu'aux environs de 1870, deux disciplines dominaient le monde de la physique :
  - La mécanique classique expliquait tous les phénomènes relatifs à la matière, dont on ne connaissait que l'aspect corpusculaire.
  - L'électromagnétisme de Maxwell expliquait tous les phénomènes relatifs au rayonnement, dont on ne connaissait que l'aspect ondulatoire .
- Ces théories se basaient sur les hypothèses suivantes:
  - L'existence d'un espace et d'un temps absolus ;
  - Tout système physique est complètement décrit par des paramètres ;
  - La valeur de ces paramètres peut être déterminée à tout instant avec une bonne précision.

# Les fondements de la Mécanique Quantique

- Fin du XIXème siècle, des expériences liées au monde des très grandes vitesses ou de l'infiniment petit ont ébranlé les principes scientifiques alors établis:
  - Le rayonnement du corps noir
  - L'effet photoélectrique
  - L'effet Compton
  - La stabilité de l'édifice atomique
  - La diffusion des électrons
- Pour expliquer ces phénomènes, de nouvelles théories ont été élaborées. Il s'agit de :
  - 1905 : la relativité d'Einstein ( $v$  proche de  $c$ ).
  - 1900 - 1927 : la Mécanique Quantique (échelle atomique).

# I. COMPORTEMENT CORPUSCULAIRE DES ONDES

- Le rayonnement du corps noir
- L'effet photoélectrique
- L'effet Compton

# 1- Rayonnement du corps noir

## a. Définition

- Un corps noir est un corps qui absorbe intégralement les radiations qu'il reçoit. On le réalise seulement artificiellement en considérant une cavité vide percée d'un petit trou. Toute radiation pénétrant par ce trou n'aura presque pas de chance d'en sortir après avoir été affaiblie par plusieurs réflexions successives sur les parois internes de cette cavité (Figure 1)

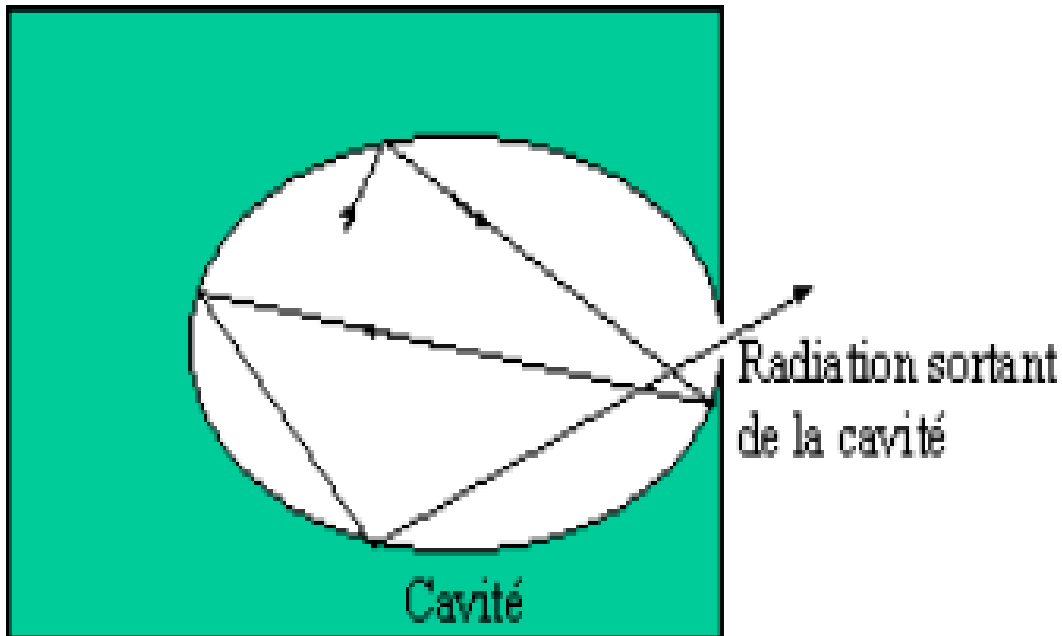


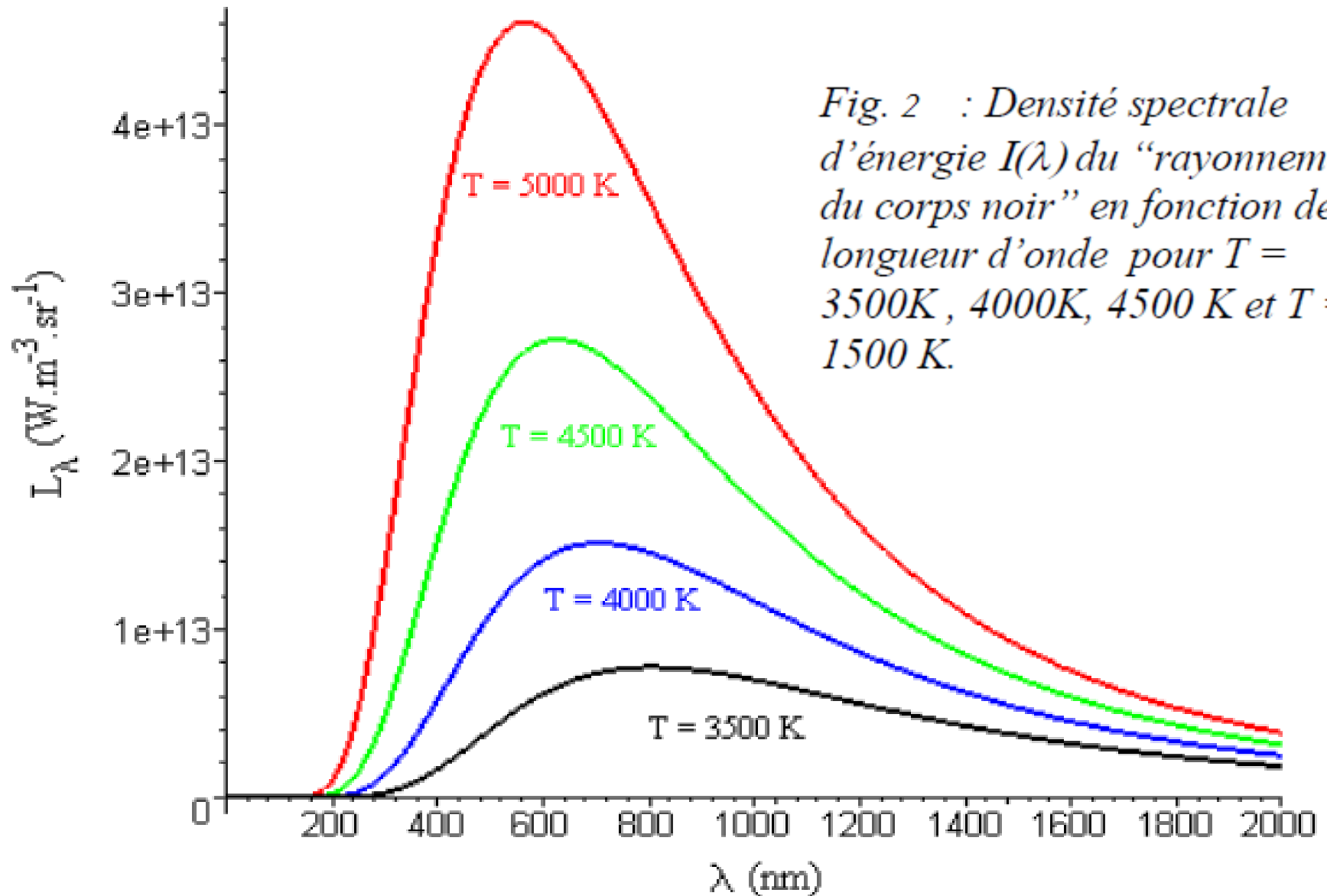
Fig. 1 : modèle physique du corps noir.

# 1- Rayonnement du corps noir

## b- Expérience

- Chacun a pu observer l'émission optique d'un corps porté à haute température : un four ou une lampe à incandescence par exemple. A **600°C**, il est rouge sombre, à **1200°C** sa couleur devient plus claire et plus vive, à **2500°C** il émet une lumière blanche intense.
- L'analyse spectrale de la lumière émise révèle un spectre continu où toutes les fréquences  $\nu$  sont représentées.
- Le profil de la densité d'énergie lumineuse est représenté sur la figure 1
- $U(\nu) d\nu$  est la quantité d'énergie émise par unité de volume, par les fréquences situées entre  $\nu$  et  $\nu+d\nu$ .

# Spectre d'émission d'un corps porté à hautes températures (corps noir)



*Fig. 2 : Densité spectrale d'énergie  $I(\lambda)$  du "rayonnement du corps noir" en fonction de la longueur d'onde pour  $T = 3500\text{K}$ ,  $4000\text{K}$ ,  $4500 \text{ K}$  et  $T = 1500 \text{ K}$ .*

### c. Explication classique du phénomène

- $U(\nu)$  présente un maximum ;
- ces maxima sont une fonction croissante de  $T$  (si  $T \nearrow \Rightarrow U_{\max} \nearrow$ ) ;
- ces maxima se déplacent vers les grandes fréquences :  $T_1 > T_2 \Rightarrow \nu_1 > \nu_2$

(ou les faibles longueurs d'onde : si  $T_1 < T_2 \Rightarrow \lambda_1 > \lambda_2$ ) ;

- Rayleigh et Jeans, utilisant la théorie électromagnétique et la mécanique statistique, proposèrent que “le champ électromagnétique rayonne est dû à un ensemble dénombrable d'oscillateurs harmoniques linéaires qui vibrent”.

$$I_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T$$

- Où  $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$  est la constante de Boltzmann et  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$  est la vitesse de la lumière.

- La loi de Stephan :  $P = \sigma T^4$  ( est une constante universelle)

- La loi de Wien :  $\lambda_{\max} T = Cste \approx 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$

# Limites des théoriques classiques

- Erreur de représentation des courbes de Stephan et Wien
- La densité d'énergie rayonnée est alors donnée par :

$$I_\nu(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2$$

- Cette loi est quadratique en  $\nu$  et n'est donc pas en accord avec l'expérience que pour les faibles fréquences. En outre, elle est inacceptable physiquement car l'intégrale de  $I_\nu(\nu, T)$  par rapport à  $\nu$  diverge, ce qui conduirait à une énergie rayonnée infinie, c'est "la catastrophe de l'ultraviolet".

$$I(T) = \int_0^\infty I_\nu(T) d\nu = \infty \text{ (catastrophe de l'UV)}$$

- Ce qui est contraire à la nature où tout est fini quel que soit sa grandeur.

# Explication quantique

- Loi de Planck (1900) émet l'hypothèse suivante:
  - chaque atome du corps noir se comporte comme un oscillateur qui absorbe et émet de l'énergie ;
  - les échanges se font par quantités discrètes multiples entiers d'un quantum d'énergie  $E = h\nu$ , où  $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$  J.s
- L'hypothèse de Planck associée aux méthodes de la thermodynamique statistique conduit à la formule dite de Planck:

- $$I_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{\left(e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1\right)}$$

- $\nu \rightarrow 0$ ,  $e^{\frac{h\nu}{k_B T}} \approx 1 + \frac{h\nu}{k_B T}$ , par conséquent,

- $$I_{\nu}(T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \quad (\text{loi de Rayleigh et Jeans})$$

# Luminance et Puissance énergétique

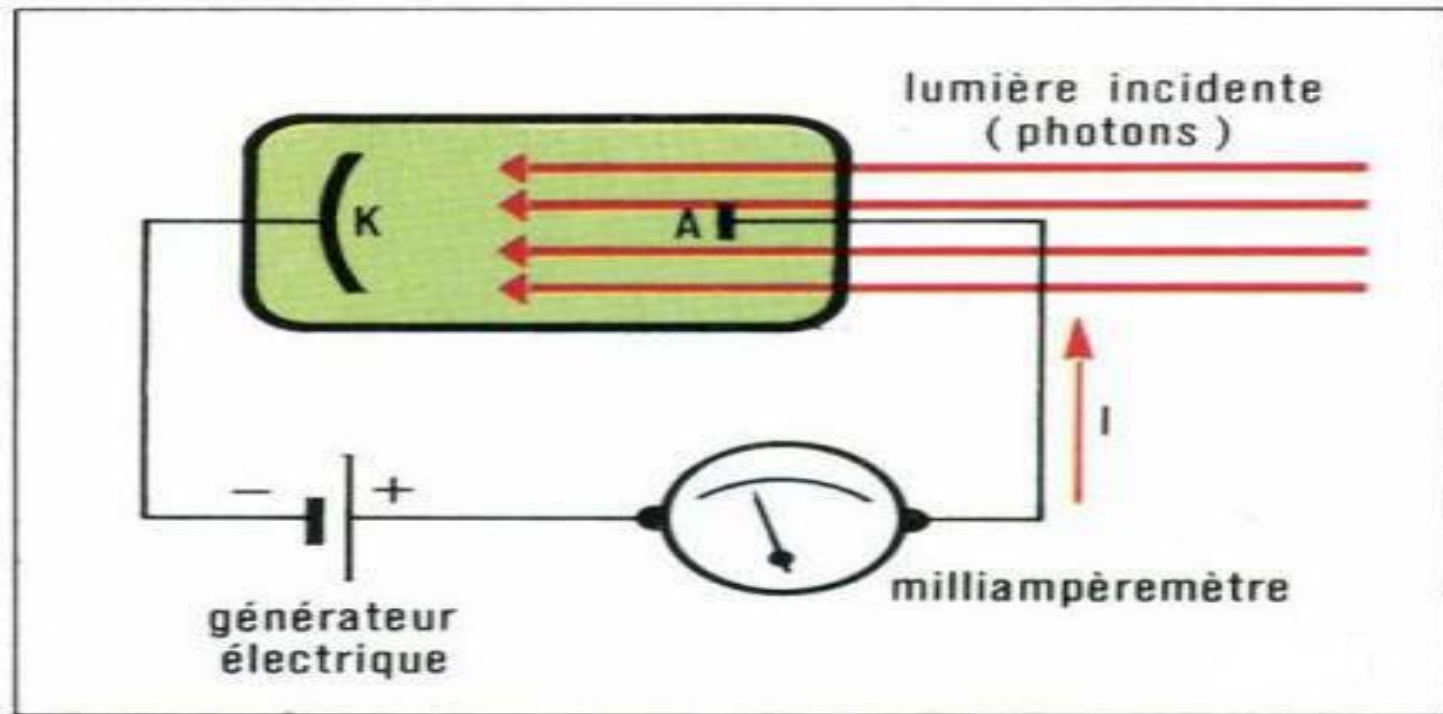
- Luminance énergétique  $L_{\nu}$  ou  $L_{\omega}$  ou  $L_{\lambda}$  est la puissance par unité de surface du rayonnement passant ou étant émis en un point d'une surface, et dans une direction donnée par unité d'angle solide.
- $L_{\nu} = \frac{c}{4} I_{\nu}$
- La puissance énergétique rayonnée:
- $P = \int_0^{\infty} L_{\nu} d\nu = \int_0^{\infty} L_{\omega} d\omega = \int_0^{\infty} L_{\lambda} d\lambda$

- En conclusion

Planck a pu expliquer les lois principales du rayonnement du corps noir en supposant que l'échange d'énergie entre la matière et le rayonnement s'opère, non pas continûment comme dans la théorie classique, mais sous forme discontinue.

## 2. Effet photoélectrique

- Cet effet, découvert par Hertz en 1887, ne trouvait pas d'explication dans le cadre des théories classiques
- Dispositif expérimental



# Effet photoélectrique

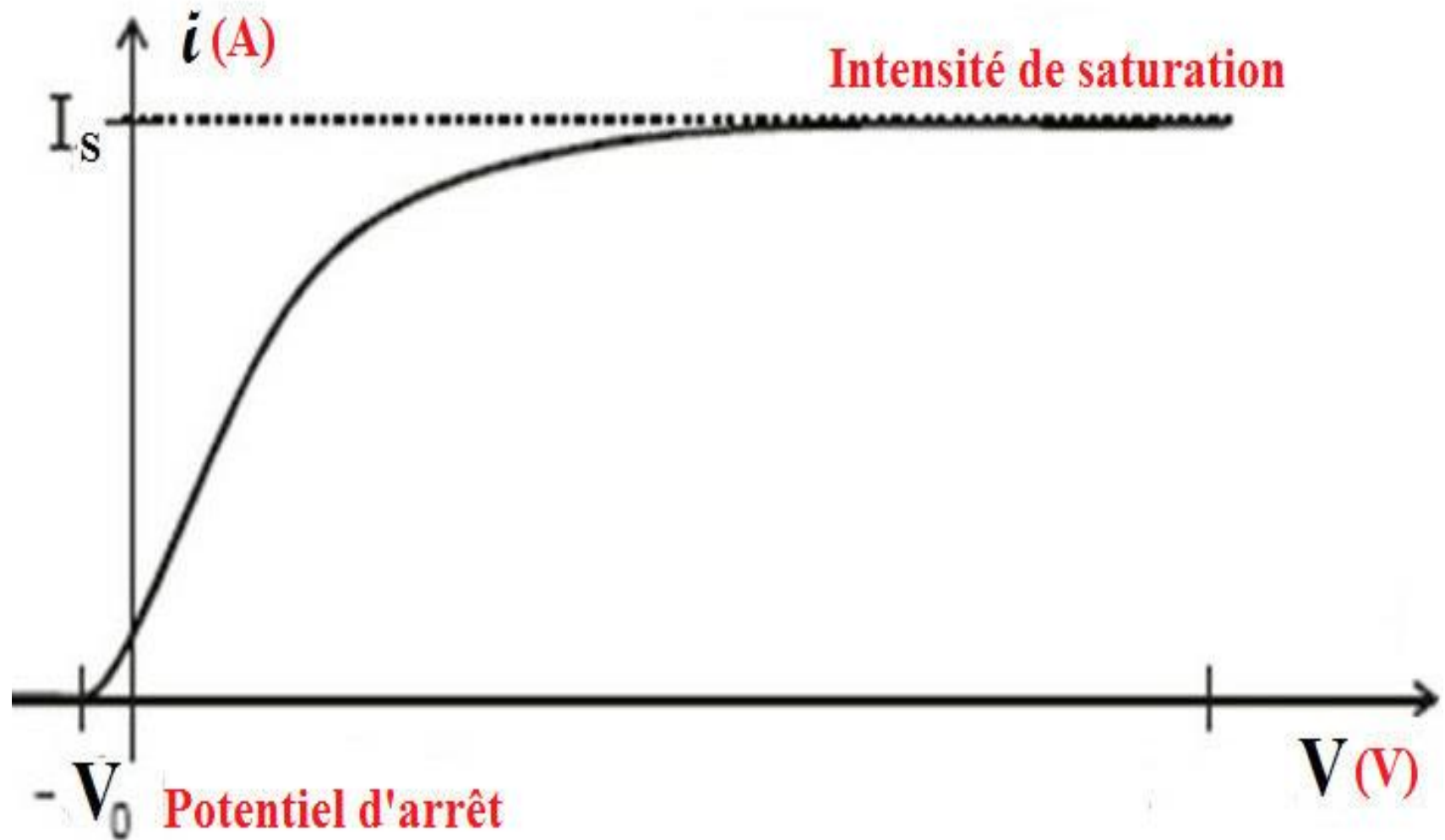
- L'expérience consiste à éclairer une plaque K. Des électrons sont arrachés et collectés par l'anode. Une ddp est maintenue entre A et K et un photocourant  $i$  parcourt le circuit. Il est mesuré à l'aide d'un microampèremètre
- L'expérience consiste à mesurer l'intensité du courant qui traverse la cellule photoélectrique en fonction des trois paramètres expérimentaux:
  - La puissance  $P$  du rayonnement incident, c'est à dire la quantité d'énergie apportée par la lumière à la cathode par unité de temps.
  - La fréquence  $\nu$  du rayonnement incident, à laquelle correspond la longueur d'onde  $= c\nu$ .
  - $V = V_A - V_C$  : la différence de potentielle entre l'anode et la cathode

# Effet photoélectrique

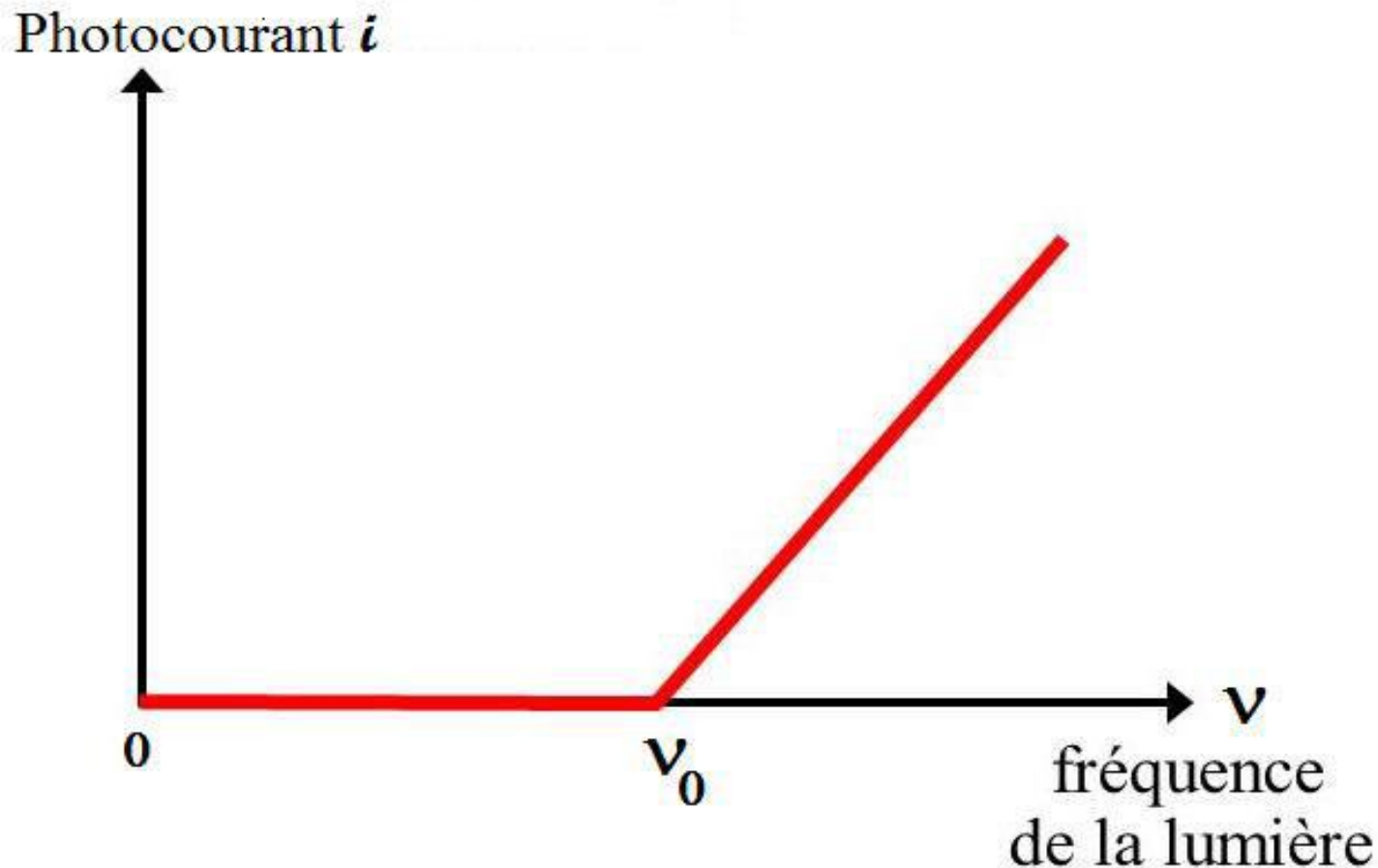
La puissance électrique  $P$  et la fréquence du rayonnement  $\nu$  sont constantes

- On constate que : quand  $V$  augmente,  $i$  tend vers  $I_s$  courant de saturation
- si  $V = 0$ ,  $i \neq 0 \rightarrow$  Même sans tension accélératrice, des électrons parviennent à l'anode A.
- $i = 0$  quand  $V = -V_0$  ;  $V_0$  est le potentiel d'arrêt
- En mesurant le potentiel d'arrêt  $V_0$ , on peut déterminer l'énergie cinétique maximale  $E_{cmax}$  des électrons émis par la cathode.
- $E_{cmax} = -eV_0$ .
- Entre A et K, on a :  $\frac{1}{2}mv_A^2 - \frac{1}{2}mv_K^2 = eV_{AK}$

# Intensité du photocourant en fonction de la tension Fig 4



- Etude de  $i = f(\nu)$  pour une puissance électrique  $P$  donnée
- l'effet photoélectrique apparaît dès que  $\nu > \nu_0$ . Il y a donc un seuil en fréquence  $\nu_0$ . Fig 5.  $i = f(\nu)$

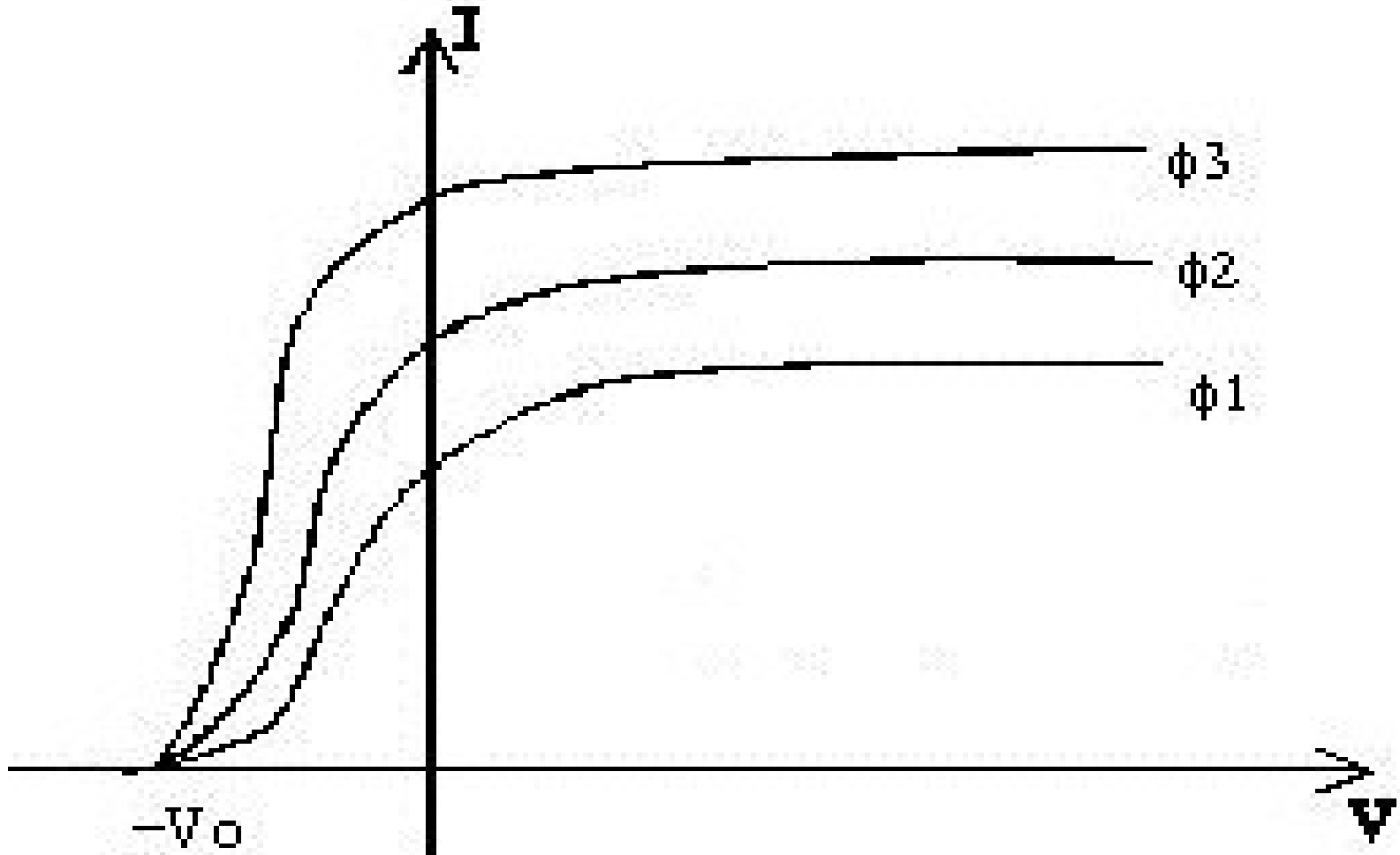


# On étudie $i = f(V)$ pour une fréquence $\nu$ donnée, avec la puissance électrique $P$ variable

Selon Fig 5 ci-dessous,

- Si la puissance du rayonnement varie, on a différentes courbes ;
- le potentiel d'arrêt  $V_0$  est identique quelque soit la puissance du rayonnement  $P$  ;
- quand  $P \nearrow$ ,  $I_s \nearrow$ . Pour  $\nu > \nu_0$  et  $V > -V_0$ , l'effet photoélectrique apparaît quelque soit l'éclairement ou flux lumineux  $\mu$  : il n'y a pas de seuil en flux lumineux.
- En résumé, il faut retenir existence d'un seuil en fréquence mais absence d'un seuil en flux lumineux.
- Ces deux remarques sont en contradiction avec la théorie classique de Maxwell : soit un seuil en flux lumineux mais pas de seuil en fréquence.

**Fig6 : Intensité du photocourant en fonction de la tension pour différentes puissances lumineuses**



# Interprétation quantique de l'Effet PE

- Einstein apporte la solution en postulant qu'un faisceau lumineux est constitué de grains d'énergie qu'il appelle photons.
- L'énergie du photon est égale à  $h\nu$  et une vitesse de propagation dans le vide égale à  $c$ .
- lorsqu'on éclaire la photocathode, chaque photon entre en interaction avec la matière et éjecte un électron ;
- le seuil en fréquence correspond à la valeur  $\nu_0$  telle que  $W_0 = h\nu_0$  est le travail d'extraction (ou de sortie) des électrons de la matière. Les électrons sont arrachés sans être déplacés ;
- si  $\nu > \nu_0$  il y aura un excédent d'énergie qui correspond à l'énergie cinétique emportée par les électrons quittant la matière :  $h\nu - W_0 = \frac{1}{2}mv^2$ , C'est l'énergie qui permet aux électrons d'atteindre l'anode, même si elle est polarisée négativement ( $-V_0$ ).
- Il n'y a pas de seuil en flux lumineux car un seul photon suffit à arracher un électron, donc à déclencher l'effet photoélectrique, à la condition fondamentale que  $\nu \geq \nu_0$

- **En conclusion**
- Einstein confère une nature corpusculaire, granulaire ou particulaire à la lumière. Cette particule relativiste s'appelle photon, d'énergie  $h\nu$ , de masse nulle au repos, de vitesse  $c$  et  $\mathbf{p} = h\nu/c$ .
- Le rendement quantique de la cellule est le rapport du nombre de photons efficaces  $n'$  (ou électrons éjectés) par le nombre de photons incidents  $n$  (ou émis par la source) :  $r = n'/n$ .
- La puissance reçue par la cathode est :  $p = nh\nu/t$  et l'intensité de saturation est liée à  $n'$  :  $I_s = n'e/t$ .

# Exercices d'application:

- *Exemple 1: Calculez l'énergie d'un photon si:*
- a)  $\lambda = 400 \text{ nm}$
- b)  $\lambda = 700 \text{ nm}$ , Remarque:  $1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ J}$
  
- *Exemple 2: L'intensité de la lumière solaire à la surface terrestre est environ  $1400 \text{ W/m}^2$ . Si l'énergie moyenne d'un photon est de  $2 \text{ eV}$  ( $\lambda = 600 \text{ nm}$ ), calculez le nombre de photons frappant une surface de  $1 \text{ cm}^2$  à chaque seconde.*
  
- *Exemple 3 : Si la longueur d'onde maximale pour observer l'effet photoélectrique est de  $564 \text{ nm}$  dans le cas du potassium (K), calculez:*
- a) *Le travail d'extraction :*
- b) *Si la longueur d'onde de la lumière utilisée est de  $400 \text{ nm}$ , déterminez l'énergie cinétique maximale des photoélectrons.*

- **Solution 1:** La lumière visible contient des photons dont l'énergie varie entre: 1,77 et 3,1eV

- $E = h\nu = h\frac{c}{\lambda}$

a)  $\lambda = 400 \text{ nm}$  ,  $E = 3,1 \text{ eV}$

b)  $\lambda = 700 \text{ nm}$  ,  $E = 1,77 \text{ eV}$

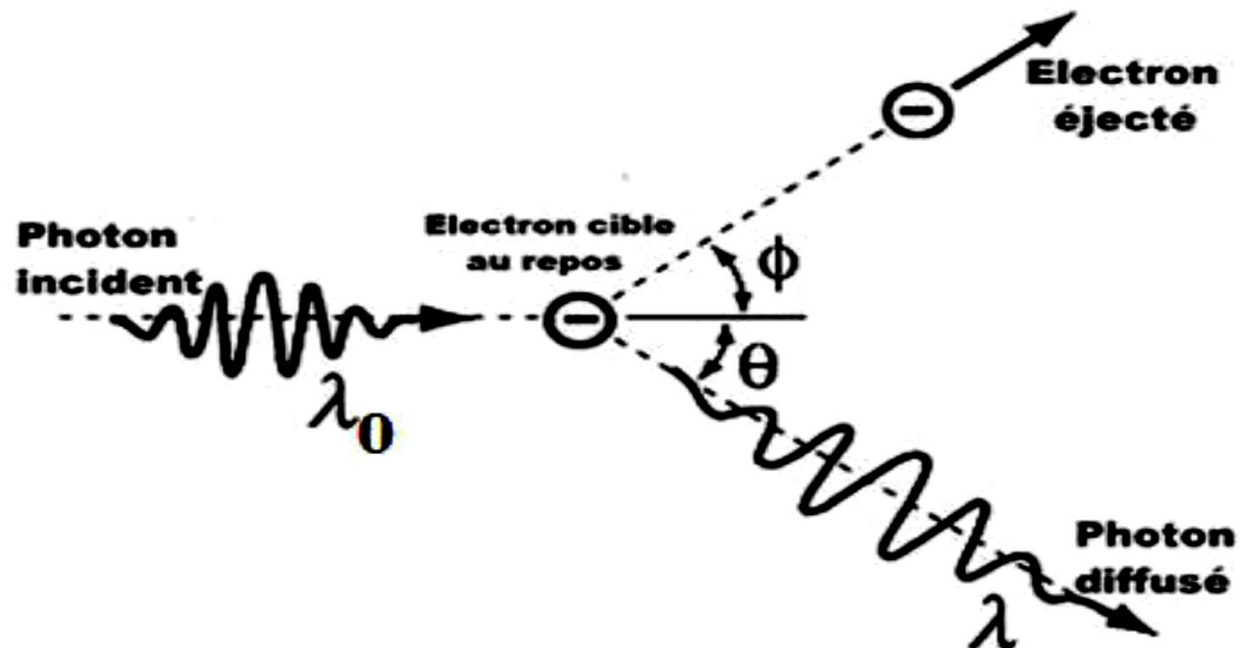
- **Solution 2 :**

- A chaque seconde  $1400 \text{ J/m}^2 = 0,14 \text{ J/cm}^2$ . Si N est le nombre de photons de 2 eV d'énergie qui possèdent au total 0,14 J ( $8,75 \times 10^{17} \text{ eV}$ ).

- On trouve  $N = 4,38 \times 10^{17}$  photons (à chaque seconde).

# 3-Effet Compton (1923)

- C'est la diffusion de la lumière par les électrons du milieu traversé.
- L'effet Compton est donc interprété comme la diffusion élastique d'un photon d'énergie  $h\nu$  avec un électron libre initialement au repos.
- Expérience



- On isole une radiation dans la direction  $\theta$  et on mesure sa longueur d'onde  $\lambda$  à l'aide d'un interféromètre. On trouve :  $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = f(\theta)$ .
- Interprétation théorique
  - ❖ **Classique** : La théorie ondulatoire de la lumière prévoit une diffusion identique dans toutes les directions sans variation de la longueur d'onde ; soit  $\lambda = \lambda_0$ , ce qui est en contradiction avec l'expérience.

# Explication quantique de l'Effet Photoélectrique

- $\lambda \neq \lambda_0$
- Compton suppose que les photons  $X$  sont des corpuscules qui entrent en collision avec les électrons de la cible.
- Il y a conservation de la **quantité de mouvement et de l'énergie**
  - $$\begin{cases} E + E_0 = E' + E_e \\ \vec{P} = \vec{P}' + \vec{P}_e \end{cases}$$
  - où  $E, P$  et  $E', P'$  sont respectivement les énergie et quantité de mouvement des photons incident et diffusé et  $E_0$  l'énergie de l'électron au repos et  $E_e$  et  $P_e$  son énergie et sa quantité de mouvement après le choc avec le photon.
  - $\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$ . Avec  $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$  masse relativiste
  - $h/mc$  est la longueur d'onde de Compton

• En conclusion :

L'effet Compton vérifie expérimentalement que le photon possède une impulsion  $\mathbf{p} = h\nu/c$ .

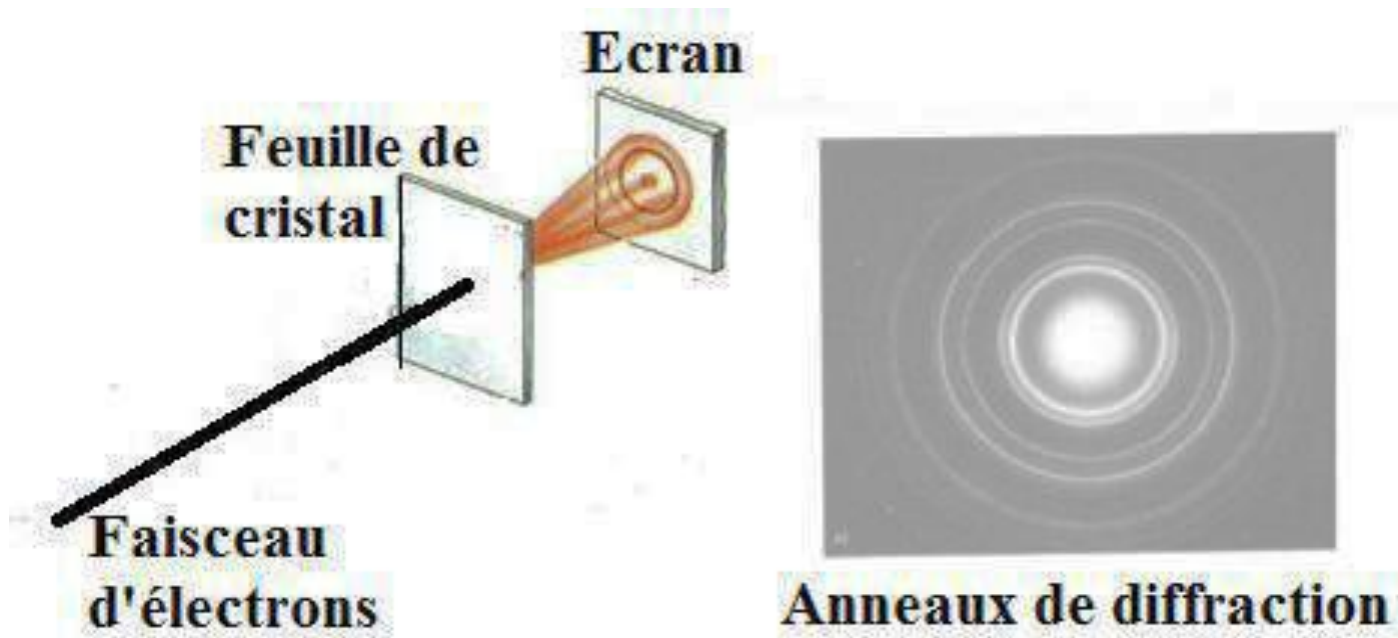
# II. Aspect ondulatoire de la matière

- La stabilité de l'édifice atomique
- La diffusion des électrons

# 1. Dualité onde- particule

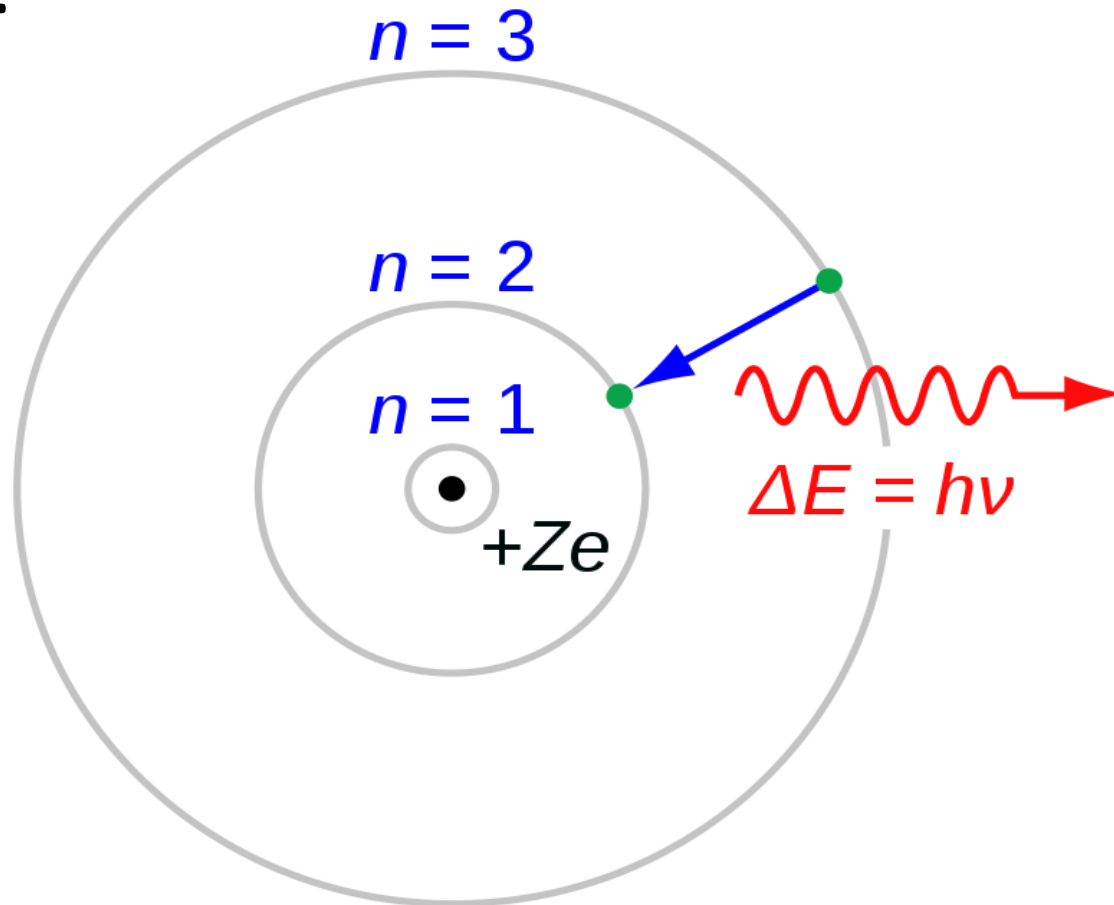
## Expérience de Davisson et Germer (1927)

- Un faisceau homogène d'électrons passe à travers une feuille de cristal (figure ci-dessous). On observe sur un écran, une figure de diffraction analogue à celle obtenue avec une OEM.
- D'où le comportement ondulatoire de particules matérielles, ainsi donc la dualité onde-corpuscule.



## 2. Stabilité de l'édifice atomique

- En 1913, Niels Bohr apporte la solution à ce problème en adoptant le modèle planétaire de Rutherford.



# Stabilité de l'édifice atomique

- Considérant l'atome d'hydrogène (le plus simple), l'électron et le proton sont soumis à l'attraction coulombienne,
- $$F_{coul} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}$$
- L'attraction gravitationnelle étant négligeable devant la  $F_{coul}$ , ( $2 \times 10^{39}$  *plus petite que*  $F_{coul}$ ), la théorie classique prédit des trajectoires **elliptiques** pour l'électron.
- Selon l'électromagnétisme, le système électron - proton se comporte comme une antenne émettrice.
- En revanche, ce qui est grave, c'est que l'électron perd de l'énergie de façon continue.
- Conséquence, le rayon de son orbite diminue, et finit par tomber sur le noyau. Ce qui n'est juste parce que l'atome d'Hydrogène est stable à température ordinaire.

# Stabilité de l'édifice atomique

- Dans le cadre quantique,
- L'électron ne peut pas toucher le noyau.
- Il ne peut pas se rapprocher du noyau au-dessous d'un certain seuil qui correspond à l'énergie minimale  $E_0$  du système que nous désignons par **niveau fondamental**.
- D'où l'existence d'un niveau fondamental d'énergie dans l'atome.

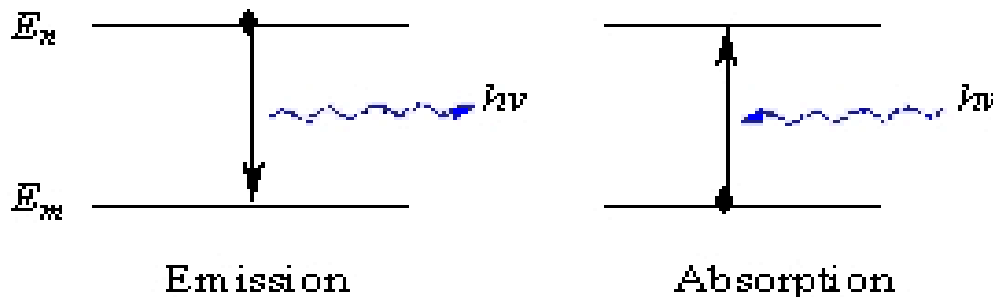
# Les postulats de Bohr

## *Premier postulat de Bohr :*

- L'électron se déplace uniquement sur certaines orbites circulaires appelées états stationnaires.

## *Deuxième postulat de Bohr*

- l'électron accéléré par le proton ne peut pas rayonner de façon continue, mais doit attendre de passer d'une orbite permise  $n$  à une autre orbite  $m$  pour émettre ou absorber brutalement un rayonnement sous la forme d'un photon d'énergie :  $h\nu_{nm} = E_n - E_m$
- La fréquence du rayonnement émis :  $\nu_{nm} = \frac{1}{h} (E_n - E_m)$



# Postulats de Bohr

**3e postulat de Bohr** ou condition de quantification de l'énergie de l'électron:

- Les seules trajectoires circulaires permises sont celles pour lesquelles le moment cinétique orbital est un multiple entier de la constante de Planck réduite  $\hbar$  :

- $L = n \hbar = m_e v r_n$

$$r_n = \frac{n\hbar}{m_e v} \quad \text{et} \quad E_n = -\frac{1}{2} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_n}$$

- $r_n$  et  $E_n$  sont respectivement le rayon et l'énergie de l'orbite n.
- **On dit que l'énergie est donc quantifiée**
- Le mouvement de l'électron est périodique et la circonférence de son orbite correspond à un nombre entier de fois la longueur d'onde de l'onde associée.

# Onde associée à une particule

- En 1924, Louis de Broglie propose de généraliser aux corpuscules, la dualité onde-corpuscule, établie pour les photons.
- A toute particule de masse  $m$  et d'impulsion  $p = mv$ , on peut associer un vecteur d'onde et une longueur d'onde :
- $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  et  $\lambda = h/mv = h/p$
- Ainsi à un électron  $(\vec{p}, E)$ , De Broglie a associé une onde  $(\vec{k}, \nu)$  où  $\nu$  est la fréquence.
- $\nu = \omega/2\pi$  ;  $\vec{k} = k\vec{u}$  est le vecteur d'onde,  $\vec{u}$  est un vecteur unitaire dans la direction de propagation de l'onde, avec  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  la longueur d'onde.
- $E = \hbar\omega$  avec  $(\hbar = h/2\pi)$  et  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$

# III. Description quantique d'une particule

- En mécanique classique, la description d'un système à un instant donné est entièrement définie par la donnée de six paramètres : les 3 composantes de la position  $\vec{r}(t)$  du centre de masse et les 3 composantes de la vitesse  $\vec{v}(t)$ .
- En mécanique quantique, la description d'un système est plus compliquée :
- Son état dynamique à un instant donné est caractérisé par la fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$  (d'après De Broglie).
- Cet état dépend d'une infinité de paramètres qui sont les valeurs prises par  $\psi(\vec{r}, t)$  en tous les points  $\vec{r}(t)$  de l'espace. En général, dans un état dynamique donné, la particule est mal localisée car  $\vec{r}(t)$  est mal déterminée.
- Remplacer la notion de trajectoire d'une particule (MC) par la notion de **probabilité de présence**  $dP$  de trouver la particule à un instant donné dans un élément de volume  $d^3r$  entourant le point  $\vec{r}(t)$  (MQ).

# 1. Propriétés de la fonction d'onde

- Soit la densité de probabilité de présence.

$$dP(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r \text{ où } |\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi(\vec{r}, t) \psi^*(\vec{r}, t)$$

- $\int_{\text{espace}} dP(\vec{r}, t) = \int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1 \quad (1)$

- $\Rightarrow \psi(\vec{r}, t)$  doit être de carré sommable ( $\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$  est fini) et normalisée de façon à satisfaire à l'équation (1).

- $\psi(\vec{r}, t)$  est interprétée comme une amplitude de probabilité de présence au point  $\vec{r}$  à l'instant  $t$ . Elle contient toutes les informations qu'il est possible d'avoir sur une particule

# 2. Expression de la fonction d'onde

## 1 - Onde plane est elle une fonction d'onde?

- Une onde plane est une onde de la forme :

$$\psi(\vec{r}, t) = \psi_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})}.$$

- $\psi_0$  est l'amplitude,  $\omega = 2\pi/T = 2\pi\nu$  est la pulsation ;

$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u} \quad \text{est le vecteur d'onde.}$$

- $\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}$  est la phase de l'onde au point M ( $\overrightarrow{OM} = \vec{r}$ ) et à l'instant,  $\vec{k} \cdot \vec{r}$  le déphasage de l'onde entre le point M et l'origine au même instant.

- $\int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3 r = |\psi_0|^2 \int_{\text{espace}} d^3 r = \infty$

- L'onde plane n'est pas de carré sommable, donc elle n'est pas une fonction d'onde.

## 2. Paquet d'ondes

- Superposition de plusieurs ondes planes dont les vecteurs d'onde respectifs  $k$ , très proches les uns des autres et variant dans un petit domaine  $\Delta k$  autour de la valeur centrale  $k_0$ .
- Pour une propagation suivant l'axe  $Ox$ ,
- $\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{g}(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$ , où  $g(k)$  est le facteur de forme de l'onde et  $g(k) \neq 0$  si  $x \in [x_0 - \frac{\Delta x}{2}; x_0 + \frac{\Delta x}{2}]$
- On montre que  $\int_{espace} |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r$  est finie, carré sommable
- Le paquet d'onde est une fonction d'onde

### 3. Vitesse de phase – Vitesse de groupe

- **Vitesse de phase** : c'est la vitesse de propagation de l'onde. Par définition elle est donnée par :  $v_{\varphi} = \frac{\omega}{k}$  avec  $\omega = f(k)$  (appelée relation de dispersion)
- **Vitesse de groupe** : c'est la vitesse du centre du paquet d'onde. Elle est définie par :  $v_g = \frac{d\omega}{dk}$
- Milieu non dispersif :  $v_{\varphi} = ct \ \forall \ \omega$  et  $v_{\varphi} = v_g$
- Milieu dispersif :  $v_{\varphi} = f(\omega)$  et  $v_{\varphi} \neq v_g$

## Exemples

- Cas du photon :  $\omega = kc$  et  $v_{\varphi} = v_g = c$
- Cas d'une particule libre (énergie purement cinétique) :  $\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$ .
- $v_{\varphi} = \frac{\hbar k^2}{2mc}$  et  $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{\mathbf{p}}{m} = \mathbf{v}$
- La vitesse de groupe du paquet d'onde est donc égale à la vitesse classique de la particule

# 4. Principe d'incertitude d'Heisenberg

- Un résultat classique en mathématique entre les largeurs approximatives de deux fonctions  $\psi(x)$  et  $\bar{\psi}(p)$ , transformées de Fourier l'une de l'autre s'écrit :
- $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar$
- C'est-à-dire, si on cherche à mesurer la position avec une grande précision (incertitude très petite), il serait impossible de définir sa vitesse avec une incertitude définie. Cette impossibilité n'est pas technique mais fondamentale et constitue le principe d'incertitude d'Heisenberg (1927).

# 5. Equation de Schrödinger

- L'équation de Schrödinger joue un rôle fondamental en MQ car elle régit l'évolution dans le temps du système.
- Connaissant la fonction d'onde à l'instant initial  $t_0$ , elle permet de la définir à un instant ultérieur  $t$ .
- Pour une particule de masse  $m$ , non relativiste, en mouvement sur l'axe  $Ox$ , placée dans un potentiel  $V(x,t)$ , l'équation de Schrödinger a pour expression :

- $$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x,t) \cdot \psi(x,t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) \quad (1)$$

- Ou simplement, 
$$H \psi(x,t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t)$$

- Avec  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)$  appelé Hamiltonien de la particule associé à l'énergie totale du système.

- En général 
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(r,t)$$

# 5.1. Conditions sur l'E-S et la fonction d'onde

- Cette équation doit :
- Être linéaire et homogène : si  $\psi_1$  et  $\psi_2$  sont solutions, alors toute combinaison linéaire de  $\psi_1$  et  $\psi_2$  est aussi solution.
- Être une équation différentielle du 1er ordre par rapport au temps. C'est-à-dire que l'évolution ultérieure de  $\psi(\vec{r}, t)$  est entièrement définie par la connaissance de  $\psi(\vec{r}, t_0)$ .
- Obéir au principe de correspondance, c'est-à-dire conduire aux équations de la mécanique classique dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$ .

# RÉSOLUTION DE L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER MODÈLES À UNE DIMENSION

# 1. E-S indépendante du temps

- C'est le cas où l'énergie potentielle de la particule est indépendante du temps :  $\frac{dV(\vec{r},t)}{dt} = \mathbf{0} \Leftrightarrow V(\vec{r},t) = V(\vec{r})$
- La fonction d'onde doit vérifier dans ce cas l'équation :
- $$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x,t) + V(x) \cdot \psi(x,t) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t)$$
- Cherchons s'il existe des solutions de cette équation de la forme :  $\psi(x,t) = \varphi(x) \cdot \chi(t)$
- En reportant cette solution dans l'équation ci-dessus, on obtient :
- $$\frac{\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right) \varphi(x)}{\varphi(x)} = i \hbar \frac{\frac{\partial}{\partial t} \chi(t)}{\chi(t)}$$

# E-S indépendante du temps

- L'égalité n'est possible que si chacune de ces fonctions est en fait une constante qui représente l'énergie totale  $E$  de la particule puisque  $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$  est l'opérateur Hamiltonien associé à l'énergie totale.

- Après la résolution de l'équation : 
$$i \hbar \frac{\partial \chi(t)}{\chi(t)} = E$$
- On trouve  $\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar}$  (1)
- Avec  $\varphi(x)$  solution de l'E-S indépendante du temps

- $$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E \varphi(x)$$
 (2)

- L'équation (2) peut s'écrire :  $\mathbf{H} \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$  (3)

- L'équation (3) est appelée : équation aux **valeurs propres de l'opérateur** ou **équation aux états stationnaires de l'énergie**.

## 2. Superposition des états stationnaires

- Un état stationnaire est un état pour lequel l'énergie est indépendant du temps.
- Les états stationnaires de la particule ont donc pour fonction d'onde :  $\psi(x,t) = \varphi(x) e^{-iEt/\hbar}$ .
- Mais, on sait que toute combinaison linéaire de cette fonction est aussi solution de l'équation de Schrödinger, ce qui donne :

- $\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t) = \sum_n c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$

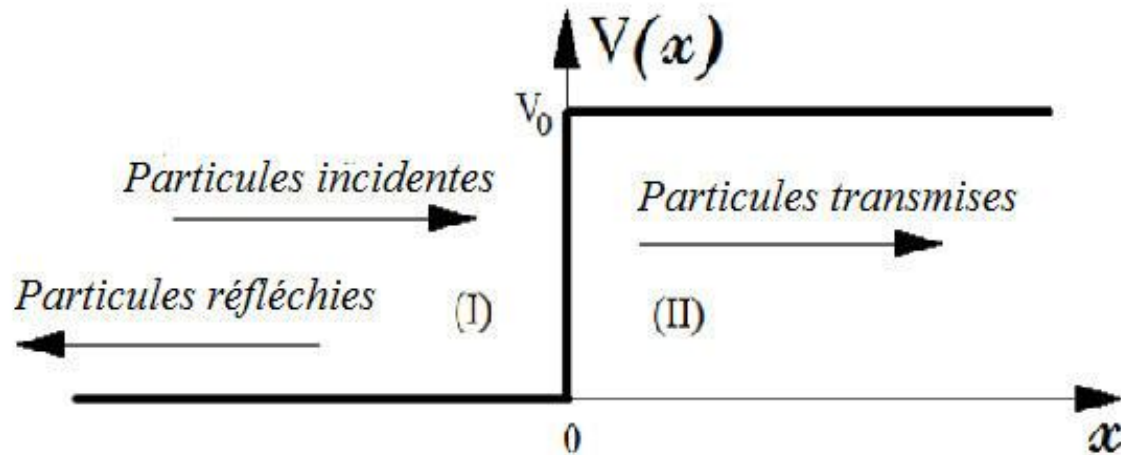
où les  $c_n$  sont des coefficients complexes, à  $t = \mathbf{0}$  on a  $\psi(x, \mathbf{0}) = \sum_n c_n \varphi(x)$ .

# 3. Etude de quelques systèmes quantiques à une dimension

- Ces modèles représentent des approches parfois excellentes de systèmes réels.
- **Quelle est la réaction des particules face aux obstacles (puits de potentiel ou barrières de potentiel) dans le cas de la Mécanique Quantique?**

# 3.1-Marche de potentiel

- Le problème n'a de sens que si  $E > 0$ .



$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pour } x \leq 0 \\ V_0 & \text{pour } x > 0 \end{cases}$$

- a -Etude classique**
- $E > V_0$ , la particule franchit la marche de potentiel en perdant une partie de son énergie cinétique égale à l'énergie potentielle  $V_0$  acquise. On dit qu'il y a **transmission totale**.
- $E < V_0$ , la particule ne peut pas franchir la marche de potentiel et repartira en sens inverse avec la même vitesse. On dit qu'il y a **réflexion totale**.

# 3.1-Marche de potentiel

- Etude en mécanique quantique (2 cas)
- Cas  $E > V_0$
- Dans les régions I et II de potentiel constant, les solutions de l'équation de Schrödinger sont :
- Région I ( $x \leq 0$  et  $V = 0$ ):  $\Phi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$
- Région II ( $x > 0$ ,  $V = V_0$ ):  $\Phi_{II}(x) = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$

Avec  $k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$ , et  $k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$

- On pose  $\Phi_I^{inc}(x) = Ae^{ik_1x}$  représente l'onde incidente et  $\Phi_I^{ref}(x) = Be^{-ik_1x}$  est l'onde réfléchie.
- En rencontrant la discontinuité de potentiel, l'onde incidente peut se séparer en  $\Phi_I^{ref}(x)$  et  $\Phi_{II}^{tran}(x) = Ce^{ik_2x}$
- L'onde ne se propageant pas vers les  $x < 0$ ,  $D = 0$ .

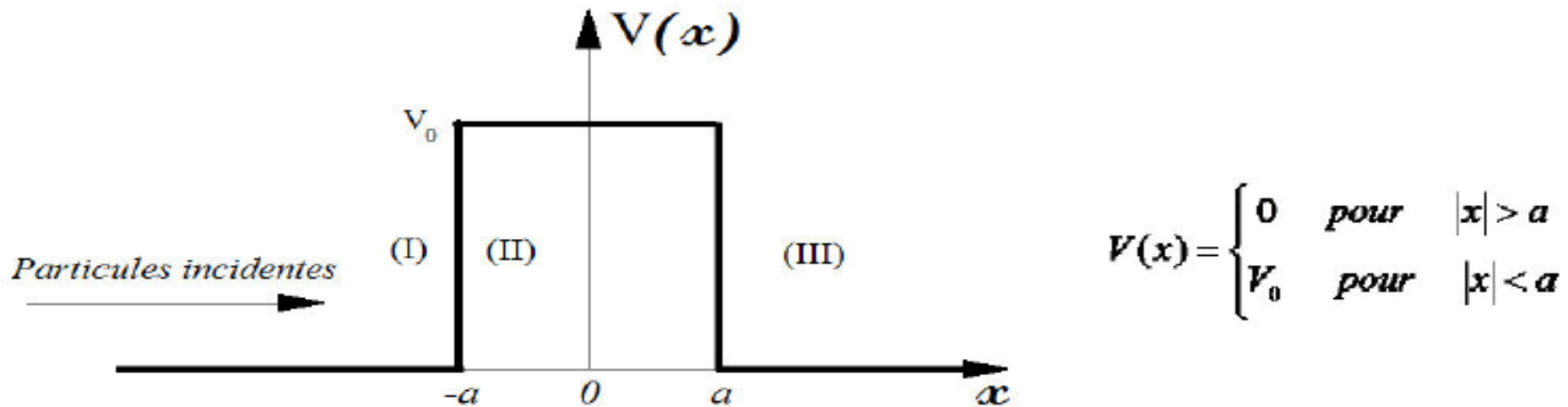
# 3.1-Marche de potentiel

- Continuité de la fonction et sa dérivée au point  $x = 0$ 
  - $\Phi_I(0) = \Phi_{II}(0) \Leftrightarrow A + B = C$
  - $\Phi_I'(0) = \Phi_{II}'(0) \Leftrightarrow k_1(A - B) = k_2C$
- Les coefficients de transmission T et de réflexion R tels que
  - $R = \frac{v^{ref}}{v^{inc}} \frac{|\Phi_I^{ref}|^2}{|\Phi_I^{inc}|^2} = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2}$  et
  - $T = \frac{v^{tran}}{v^{inc}} \frac{|\Phi_{II}|^2}{|\Phi_I^{inc}|^2} = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$
- On a  $R+T=1$

# 3.1-Marche de potentiel

- Cas  $0 < E < V_0$
- Région I ( $x \leq 0$  et  $V = 0$ ),  $\Phi_I(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$
- Région II ( $x > 0$  et  $V = V_0$ ):  $\Phi_{II}(x) = De^{k_2x} + Ce^{-k_2x}$
- La fonction doit tendre vers une valeur finie. Or  $De^{k_2x} \rightarrow +\infty$  quand  $x \rightarrow +\infty$ , cela implique que  $D = 0$ .
- Les conditions de continuité des fonctions au point  $x = 0$  donnent :  $B = A \cdot \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2}$  et  $C = A \cdot \frac{2k_1}{k_1 + ik_2}$
- Il faut remarquer que :  $|A| = |B|$ , d'où  $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1$
- Le coefficient de réflexion  $R=1$ , donc  $T=0$ . Or  $T = \frac{|C|^2}{|A|^2} \neq 0$ . Ce qui implique que la vitesse de groupe du paquet d'ondes est nulle dans la région (2).

## 3.2- Effet tunnel



- Selon la théorie classique,
- si l'énergie des particules incidentes est supérieure à la hauteur de la barrière, elles la franchissent (transmission totale).
- Si son énergie inférieure à  $V_0$ , les particules sont toutes réfléchies et repartent en sens inverse avec la même vitesse (réflexion totale).

- En mécanique quantique, si l'on se place dans le cas où  $E < V_0$ , l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\text{Région I et III (} V = 0 \text{)} : \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \quad \text{posons } k_0^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$\text{Région II (} V = V_0 \text{)} : \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \phi(x) = 0 \quad \text{posons } k^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$$

Les solutions sont :

$$\text{Région I} \quad x < -a \quad \phi_I(x) = Ae^{ik_0x} + Be^{-ik_0x}$$

$$\text{Région II} \quad -a < x < +a \quad \phi_{II}(x) = Ce^{-kx} + De^{kx}$$

$$\text{Région III} \quad x > +a \quad \phi_{III}(x) = Fe^{ik_0x}$$

- Pour les régions I et II, une onde incidente et réfléchie se superposent, alors que pour la région III, l'onde est simplement transmise.
- Les constantes d'intégration A, B, C, D et F sont déterminées en utilisant les conditions de continuité de la fonction, aux points  $x = -a$  et  $x = +a$ .

$$\phi_I(-a) = \phi_{II}(-a) \Rightarrow e^{-ik_0 a} + \left(\frac{B}{A}\right)e^{ik_0 a} = \left(\frac{C}{A}\right)e^{-ka} + \left(\frac{D}{A}\right)e^{ka} \quad \text{①}$$

$$\phi_I'(-a) = \phi_{II}'(-a) \Rightarrow ik_0 \left[ e^{-ik_0 a} - \left(\frac{B}{A}\right)e^{ik_0 a} \right] = k \left[ \left(\frac{C}{A}\right)e^{-ka} - \left(\frac{D}{A}\right)e^{ka} \right] \quad \text{②}$$

$$\phi_{II}(+a) = \phi_{III}(+a) \Rightarrow \left(\frac{C}{A}\right)e^{ka} - \left(\frac{D}{A}\right)e^{-ka} = \left(\frac{F}{A}\right)e^{-ik_0 x} \quad \text{③}$$

$$\phi_{II}'(+a) = \phi_{III}'(+a) \Rightarrow k \left[ \left(\frac{C}{A}\right)e^{ka} - \left(\frac{D}{A}\right)e^{-ka} \right] = ik_0 \left[ \left(\frac{F}{A}\right)e^{-ik_0 x} \right] \quad \text{④}$$

Le coefficient de transmission T de la barrière correspond au rapport des intensités de l'onde transmise à

l'onde incidente :  $T = \left| \frac{F}{A} \right|^2$

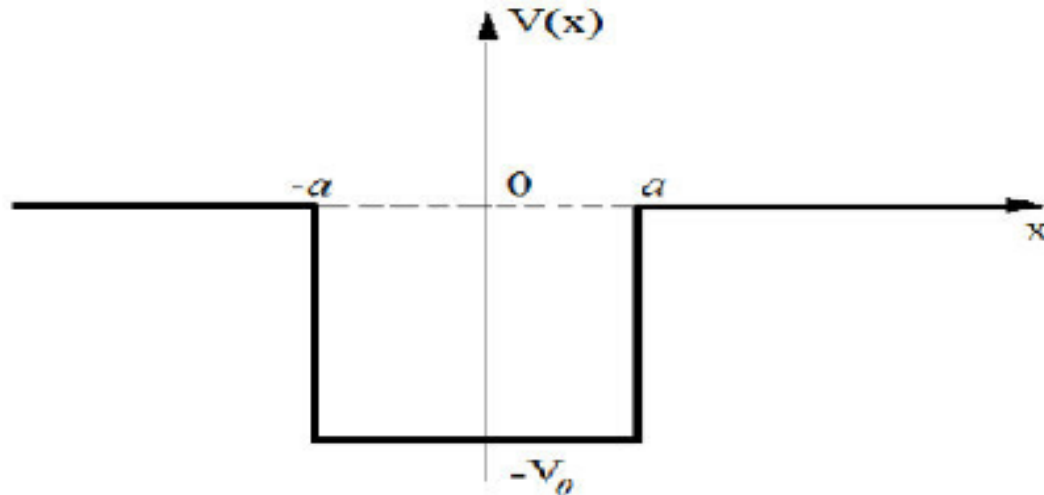
On trouve :  $\frac{F}{A} = \frac{e^{-ik_0 a}}{ch(2ka) + \frac{i\varepsilon}{2} \cdot sh(2ka)} \Rightarrow T = \frac{1}{ch^2(2ka) + \frac{\varepsilon^2}{4} \cdot sh^2(2ka)}$

Pour  $ka \gg 1 \Rightarrow E \ll V_0$ . On a :  $ch(2ka) \approx sh(2ka) = \frac{e^{2ka}}{2} \Rightarrow T = 16 \left( \frac{k_0 \cdot k}{k_0^2 + k^2} \right)^2 e^{-4ka}$  57

## 3.2. Effet tunnel

- Le coefficient de transmission  $T$ , qui représente la densité relative de particules ayant franchi la barrière est donc non nulle.
- On a une probabilité de présence non nulle des particules dans la région III. Ce passage des particules à travers une montagne de potentiel infranchissable en mécanique classique, est appelé "**effet tunnel**".
- Les particules ayant traversé la barrière par effet tunnel, se retrouvent avec les mêmes énergie et vitesse initiales.
- Mais pendant la traversée, la loi de conservation classique de l'énergie est violée. On ne sait pas observer les particules durant cette traversée.
- En mécanique quantique, il faut admettre l'existence d'états virtuels qui ne respectent pas la loi de conservation de l'énergie. Ceci ne contredit pas le principe d'incertitude d'Heisenberg: l'écart d'énergie  $\Delta E$  est toléré tant que le phénomène dure au maximum pendant  $\Delta t$  tel que :  $\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$

# 3.3- Puits de potentiel fini



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

## Fonctions propres et énergies propres

- Si  $E \geq 0$ , quelle que soit la théorie, la particule est libre. Son spectre d'énergie est continu.
- Considérons une particule de masse  $m$  confinée dans ce puits d'énergie  $E$  telle que  $-V_0 < E < 0$ .

- Les solutions sont :

$$\text{Posons : } E = \frac{\hbar^2}{2m} \varepsilon \quad -\beta^2 = \varepsilon \quad \alpha^2 = \varepsilon + U \quad U = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$$

$$\text{Région I} \quad x < -a \quad \psi_I(x) = Ae^{\beta x} + Be^{-\beta x}$$

$$\text{Région II} \quad -a < x < +a \quad \psi_{II}(x) = Ce^{-i\alpha x} + De^{i\alpha x}$$

$$\text{Région III} \quad x > +a \quad \psi_{III}(x) = Fe^{-\beta x} + Ge^{\beta x}$$

### ***Etude des conditions aux limites***

- La fonction d'onde doit satisfaire aux conditions suivantes :
  - ✓ elle est bornée quand  $x \rightarrow \pm \infty$  et de carré sommable ;
  - ✓ elle est continue et sa dérivée est aussi continue.

$x \rightarrow -\infty$  correspond à la région I, donc à la fonction d'onde  $\psi_I(x)$ . Puisque cette fonction doit être bornée, cela impose que  $B = 0$ . De même,  $x \rightarrow +\infty$  correspond à la région III, donc à la fonction d'onde  $\psi_{III}$ . On en déduit que  $G = 0$ . Il apparaît qu'en dehors du puits de potentiel, les fonctions d'onde tendent à s'annuler. La particule est donc localisée au voisinage du puits : la particule est alors dans un **état lié**.

On a  $V(x) = V(-x) = -V_0$ . Les solutions sont des combinaisons linéaires paires ou impaires :

$$\psi_{\text{paire}}(x) = \frac{1}{2} [\psi_{\text{II}}(x) + \psi_{\text{II}}(-x)] = \lambda \cos \alpha x$$

$$\psi_{\text{impaire}}(x) = \frac{1}{2} [\psi_{\text{II}}(x) - \psi_{\text{II}}(-x)] = \mu \sin \alpha x$$

En résumé, les fonctions d'onde associées à la particule dans le puits de potentiel sont :

Région I       $x < -a$        $\psi_{\text{I}}(x) = Ae^{\beta x}$

Région II       $-a < x < +a$        $\psi_{\text{paire}}(x) = \lambda \cos \alpha x$     et     $\psi_{\text{impaire}}(x) = \mu \sin \alpha x$

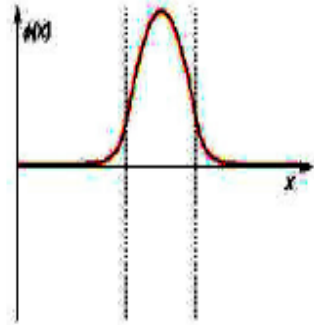
Région III       $x > +a$        $\psi_{\text{III}}(x) = Fe^{-\beta x}$

**Il existe une probabilité de présence non nulle hors du puits ( $|\psi_{\text{I}}|^2 = |A|^2$     et     $|\psi_{\text{III}}|^2 = |F|^2 e^{-2\beta x}$ ) même si  $E < V_0$  contrairement à la mécanique classique.**

Pour déterminer les constantes d'intégration A, F,  $\lambda$  et  $\mu$ , il faut utiliser les conditions de continuité en  $x=a$  :

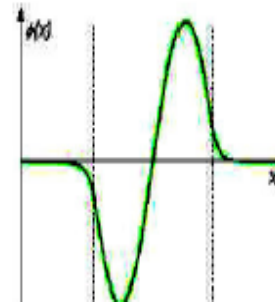
*Niveaux pairs*

$$\psi_{\text{paire}}(a) = \psi_{\text{III}}(a) \text{ et } \psi'_{\text{paire}}(a) = \psi'_{\text{III}}(a) \quad \left[ \frac{\psi'_p}{\psi_p} \right]_a = \left[ \frac{\psi'_{\text{III}}}{\psi_{\text{III}}} \right]_a \Rightarrow \text{tg } \alpha a = \frac{\beta}{\alpha}$$



*Niveaux impairs*

$$\psi_{\text{impaire}}(a) = \psi_{\text{III}}(a) \text{ et } \psi'_{\text{impaire}}(a) = \psi'_{\text{III}}(a) \quad \left[ \frac{\psi'_i}{\psi_i} \right]_a = \left[ \frac{\psi'_{\text{III}}}{\psi_{\text{III}}} \right]_a \Rightarrow \text{tg } \alpha a = -\frac{\alpha}{\beta}$$

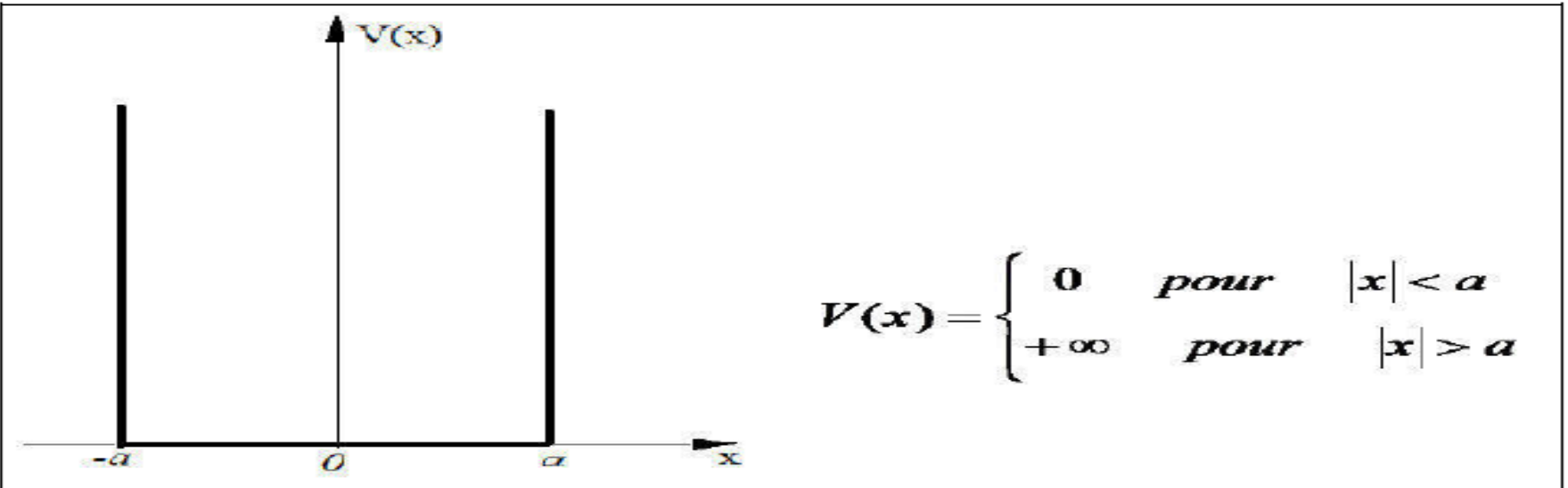


Pour les solutions impaires :  $E_n + V_0 = n^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left( \frac{\pi}{2} \right)^2$  avec  $n = 1, 3, 5, \dots$

Pour les solutions paires :  $E_n + V_0 = n^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \cdot \left( \frac{\pi}{2} \right)^2$  avec  $n = 2, 4, 6, \dots$

Les énergies forment une suite discontinue. On dit que l'énergie est quantifiée et  $n$  qui numérote et détermine les niveaux d'énergie est appelé **nombre quantique**. On aura alors un **spectre discret**.

# 3.4-Puits de potentiel infini



## Détermination des états propres

La particule est astreinte à se mouvoir dans l'intervalle  $[-a, a]$ .

La particule est donc enfermée dans un puits de potentiel aux parois infranchissables, ainsi la densité de probabilité de présence (et donc la fonction d'onde  $\phi(x)$ ) est nulle en dehors de cette zone :

$$\phi(x) = 0 \text{ pour } |x| > a$$

Le problème est donc de trouver l'expression de la fonction d'onde dans l'intervalle  $[-a, a]$ , vérifiant les conditions de continuité i.e. s'annuler aux bornes de  $[-a, a]$ .

# Détermination des états propres

- Dans l'intervalle  $[-a, a]$ ,  $V(x)$  est paire et garde une valeur constante nulle. La forme générale de la solution de l'équation de Schrödinger est :

$$\phi_{\text{paire}}(x) = A \cos(kx) ; \phi_{\text{impair}}(x) = B \sin(kx) \text{ avec } k^2 = \varepsilon$$

## Quantification de l'énergie

- Les conditions aux limites  $\phi(-a) = \phi(a) = 0$  donnent :
- a) Fonctions paires :

$$A \cos(-ka) = A \cos(ka) = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = \frac{2n+1}{2} \pi \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow \quad k = \frac{2n+1}{2a} \pi$$

$$\Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\pi^2}{4a^2} \cdot (2n+1)^2$$

# Détermination des états propres

- b) Fonctions impaires

$$\sin kx = 0 \text{ soit : } ka = n\pi \text{ et } E_I = (2n)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$$

- Les deux expressions de l'énergie peuvent se mettre sous une forme unique :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \cdot N^2 ; N=1,2,3$$

- Contrairement à la mécanique classique ces résultats montrent que :

➤ toutes les valeurs d'énergie ne sont pas permises (quantification) ;

➤ l'énergie la plus basse  $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2}$  n'est pas nulle.

# Fonctions d'onde

- a) Fonctions paires.

$$\phi_{\text{paire}}(x) = A \cos(kx) = A \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2a} x\right)$$

- La constante de normalisation A satisfait à la condition :

$$P = \int_{-a}^a \left| A \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2a} x\right) \right|^2 dx = 1$$

$$\begin{aligned} \text{Or } \cos^2(x) &= \frac{1 + \cos 2x}{2} &\Rightarrow & A^2 \cdot \int_{-a}^a \left[ \frac{1 + \cos 2\pi x \left(\frac{2n+1}{2a}\right)}{2} \right] dx = 1 \\ & &\Rightarrow & \frac{A^2}{2} \cdot \int_{-a}^a \left[ 1 + \cos\left(\frac{(2n+1)\pi x}{a}\right) \right] dx = 1 \\ & &\Rightarrow & \frac{A^2}{2} \left[ x + \frac{a}{(2n+1)\pi} \sin\left(\frac{(2n+1)\pi x}{a}\right) \right]_{-a}^a = 1 \\ & &\Rightarrow & \frac{A^2}{2} \cdot [a - (-a) + 0] = A^2 a = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sqrt{a}} \end{aligned}$$

$$\boxed{\phi_{\text{paire}}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos\left(\frac{(2n+1)\pi}{2a} x\right)}$$

# Fonctions d'onde

- b) Fonctions impaires

$$\phi_{\text{impair}}(x) = B \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

La constante de normalisation B satisfait à la condition :  $P = \int_{-a}^a \left| B \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right|^2 dx = 1$

$$\text{Or } \sin^2(x) = \frac{1 - \cos 2x}{2} \quad \Rightarrow \quad B^2 \cdot \int_{-a}^a \left[ \frac{1 - \cos\left(2\frac{n\pi x}{a}\right)}{2} \right] dx = 1$$

$$\Rightarrow \frac{B^2}{2} \left[ x - \frac{a}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right]_{-a}^a = 1$$

$$\Rightarrow \frac{B^2}{2} [a - (-a) + 0] = B^2 a = 1 \quad \Rightarrow \quad \underline{B = \frac{1}{\sqrt{a}}}$$

$$\boxed{\phi_{\text{impaire}}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)}$$

# ECUE 2

# A. Outils mathématiques de la Mécanique Quantique

- L'objectif de chapitre est d'étudier les propriétés mathématiques de l'espace des fonctions d'onde et des opérateurs agissant sur ces fonctions à l'intérieur de cet espace (une dimension).

# I. Espace des fonctions d'onde d'une particule

- Les fonctions d'une particule appartiennent à l'espace vectoriel de fonctions de carrés sommables, c-à-d  $\int_D |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau < \infty$ .

Cet espace vectoriel, noté  $\mathbb{L}^2$  et appelé espace de Hilbert, est bâti sur le corps des nombres complexes  $\mathbb{C}$ .

- Les fonctions d'onde physiquement acceptables sont

- obéissant à la condition de normalisation,  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ .
- partout définies et continues et (nulles à l'infini).

L'ensemble de ces fonctions d'onde forme un sous s.e.v de  $\mathbb{L}^2$  noté  $\mathcal{F}$ .

- I.1. Produit scalaire
- I.1.1. Définition

Soient  $\varphi(\vec{r})$  et  $\psi(\vec{r}) \in \mathcal{F}$ , le produit scalaire de  $\psi(\vec{r})$  par  $\varphi(\vec{r})$  est un nombre complexe noté  $(\varphi, \psi)$  et défini par :

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d^3r$$

- I.1.2. Propriétés

- $(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$  condition d'hermiticité

$$(\varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 (\varphi, \psi_1) + \lambda_2 (\varphi, \psi_2)$$

$$(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi) = \lambda_1^* (\varphi_1, \psi) + \lambda_2^* (\varphi_2, \psi)$$

- Le produit scalaire est linéaire par rapport à la deuxième fonction et anti linéaire par rapport à la première.

- $(\varphi, \psi) = 0 \Rightarrow \varphi(\vec{r})$  et  $\psi(\vec{r})$  sont orthogonales

- $(\psi, \psi) = \int_{\text{espace}} |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$  est un nombre réel, positif, qui est nul si et seulement si  $\psi(\vec{r})$  est nulle.

- $\sqrt{(\psi, \psi)}$  est appelée la norme de  $\psi(\vec{r})$ .

## • I.2. Base orthonormée de $\mathcal{F}$

### a. Définition

- Une famille dénombrable  $\{e_i\}$  de vecteurs de  $\mathcal{F}$  forme une base orthonormée si :
- Les  $e_i$  sont normés et 2 à 2 orthogonaux :

- $(e_i, e_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$

- Si tout vecteur  $\psi$  de  $\mathcal{F}$  peut se développer de façon unique sur les  $e_i$  :

$$\psi = \sum_i c_i e_i \quad \text{avec} \quad c_i = (e_i, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} e_i^*(x) \psi(x) dx$$

Sur cette base,  $\psi$  est représenté par une matrice unicolonne :

$$\psi = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \cdot \\ c_n \end{pmatrix}$$

## • II. Espace des états – Notation de Dirac

A toute fonction d'onde de carré sommable, Dirac associe un vecteur d'état noté  $|\psi\rangle$  et appelé *ket*  $\psi$ :

$$\forall \psi \in \mathcal{F} \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \xi \text{ (espace des états)}$$

Donc, sur une base de  $\xi$ ,  $|\psi\rangle$  est représenté par une matrice unicolonne :

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

### • II.1. Produit scalaire

Soient 2 vecteurs  $\phi$  et  $\psi$ , et une base orthonormée  $\{e_i\}$  de  $\mathcal{F}$ .

$$\phi = \sum_i^n b_i e_i, \quad \psi = \sum_j^n c_j e_j$$

$$(\phi, \psi) = \left( \sum_i^n b_i e_i, \sum_j^n c_j e_j \right) = \sum_j \sum_i b_i^* c_j \int_{-\infty}^{+\infty} e_i^*(x) e_j(x) dx = \sum_j \sum_i b_i^* c_j \delta_{ij}$$

$$(\phi, \psi) = (b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*) \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_n \end{pmatrix} = \sum_i^n b_i^* c_i$$

Dans le produit scalaire, les deux vecteurs ne jouent donc pas le même rôle. Le premier est noté  $\langle \phi |$  et appelé vecteur *bra*  $\phi$ . Il est représenté par une matrice à une ligne et à plusieurs colonnes :

$$\langle \phi | = (b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_n^*)$$

Et le produit scalaire  $(\phi, \psi)$  est noté  $\langle \phi | \psi \rangle$  dans  $\xi$ .

L'ensemble des vecteurs bra constitue un espace qu'on note  $\xi^*$  et qu'on appelle *espace dual* de  $\xi$ .

$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \langle \varphi | \psi \rangle$  où le vecteur  $\langle \varphi |$ , appelé "bra", est un élément du dual de

$\mathcal{E}$ , noté  $\mathcal{E}^*$ . Le symbole  $\langle \quad | \quad \rangle$  s'appelle "bracket".

## • II.2. Correspondance entre ket et bra

A tout *ket* correspond un *bra* et la correspondance est antilinéaire :

$$|\psi\rangle = \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\psi| = \lambda_1^* \langle\psi_1| + \lambda_2^* \langle\psi_2|$$

Comme  $|\lambda\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$  alors  $\langle\lambda\psi| = \lambda^* \langle\psi|$

- Cette correspondance est à la base des propriétés du produit scalaire défini précédemment.

## • II.3. Relation de fermeture

Soient une base  $\{|e_i\rangle\}$  et un vecteur  $|\psi\rangle$  de  $\xi$ . Ce vecteur peut se développer de façon unique suivant les  $|e_i\rangle$  :

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |e_i\rangle = \sum_i \langle e_i | \psi \rangle |e_i\rangle = \sum_i |e_i\rangle \langle e_i | \psi \rangle = \sum_i (|e_i\rangle \langle e_i |) |\psi\rangle \quad \text{avec } c_i = \langle e_i | \psi \rangle$$

- Dans cette relation ,  $\sum_i |e_i\rangle \langle e_i| = 1$

C'est la Relation de fermeture.

Exemple : Soit  $|\psi\rangle$  et une base orthonormée  $\{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ .

$|\psi\rangle$  peut se développer de façon unique sur cette base.

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^3 |e_i\rangle \langle e_i|\psi\rangle = |e_1\rangle \langle e_1|\psi\rangle + |e_2\rangle \langle e_2|\psi\rangle + |e_3\rangle \langle e_3|\psi\rangle$$

Avec  $c_1 = \langle e_1|\psi\rangle$ ,  $c_2 = \langle e_2|\psi\rangle$  et  $c_3 = \langle e_3|\psi\rangle$  les composantes de  $|\psi\rangle$  sur la base.

$$\text{D'où } |\psi\rangle = c_1|e_1\rangle + c_2|e_2\rangle + c_3|e_3\rangle$$

- **III. Les opérateurs linéaires**

- **III.1. Définition**

A est un opérateur défini sur l'e.v des états  $\xi$ , si à tout vecteur ket  $|\psi\rangle$  de  $\xi$ , il fait correspondre un autre ket  $|\psi'\rangle$  tel que :

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \text{ se note aussi } |\psi'\rangle = |A\psi\rangle$$

On dit que A transforme, par son action, ket  $|\psi\rangle$  en ket  $|\psi'\rangle$ .

- L'opérateur A est dit linéaire, si quels que soient deux vecteurs ket  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  et deux nombres complexes  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$ , il vérifie la relation :

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1(A|\psi_1\rangle) + \lambda_2(A|\psi_2\rangle)$$

- **Exemples**

Opérateur multiplication par  $x : \psi \xrightarrow{x} X\psi = x\psi = \psi'$

Opérateur dérivation par rapport à  $x : \psi \xrightarrow{D_x} D_x\psi = \frac{\partial}{\partial x}\psi = \psi'$

## • III. 2. Algèbre des opérateurs

### • Somme de deux opérateurs

$$A + B = B + A \quad (\text{commutativité})$$

$$A + B + C = A + (B + C) = (A + B) + C \quad (\text{associativité})$$

### • Produits de deux opérateurs

Soient deux opérateurs  $A$  et  $B$  et un vecteur ket  $|\psi\rangle$  de  $\xi$ . On a :

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

$$|\psi''\rangle = B|\psi'\rangle = B(A|\psi\rangle) = (BA)|\psi\rangle$$

S'il existe un opérateur  $C$  tel que  $|\psi''\rangle = C|\psi\rangle$ , alors  $C = BA$  est le *produit des opérateurs  $B$  et  $A$* .

En général,  $AB \neq BA$ . La notion d'ordre est importante dans le produit d'opérateurs.

### • Inverse d'un opérateur

Soient deux opérateurs  $A$  et  $B$  et deux vecteurs  $|\psi\rangle$  et  $|\phi\rangle$  de  $\xi$ . On a :

$$\left. \begin{array}{l} |\psi\rangle = A|\phi\rangle \\ |\phi\rangle = B|\psi\rangle \end{array} \right\} \Rightarrow |\phi\rangle = BA|\phi\rangle \quad \text{ou} \quad |\psi\rangle = AB|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad BA = AB = 1$$

Donc  $B = A^{-1}$  est appelé *inverse de  $A$* .

## • III.3. Notion de commutateurs

On appelle commutateur de A et B, noté  $[A, B]$ , la relation :  $[A, B] = AB - BA$ .

En général, le produit AB est différent du produit BA.

Lorsque  $AB - BA = 0$ , on dit que A et B commutent.

### • III.3.1. Propriétés des commutateurs

De ce qui précède, on établit les relations suivantes :

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

$$[A, (B + C)] = [A, B] + [A, C]$$

$$[A, \alpha B] = [\alpha A, B] = \alpha [A, B] \quad \alpha \text{ est un scalaire}$$

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

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

- III.4. Représentation matricielle
- a-Représentation des "kets"

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_i \\ \vdots \end{bmatrix} \quad \text{avec} \quad c_i = \langle u_i | \psi \rangle \quad \text{c'est une matrice à 1 colonne}$$

- b-Représentation des "bras"

Soit  $\langle \varphi |$  un "bra" quelconque :

$$\langle \varphi | = \langle \varphi | \mathbf{1} = \sum_i \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | = \sum_i \langle u_i | \varphi \rangle^* \langle u_i | = \sum_i b_i^* \langle u_i | \quad \text{d'où}$$

$$\langle \varphi | \rightarrow [b_1^* \quad b_2^* \quad \dots \quad b_i^* \quad \dots] \quad \text{avec} \quad b_i^* = \langle u_i | \varphi \rangle^* \quad \text{c'est une matrice à 1 ligne}$$

- On remarque que :  $\langle \varphi | \psi \rangle$  est un produit scalaire (faire le produit des deux matrices).

- **c- Représentation des opérateurs**

Un opérateur linéaire sera représenté par une matrice carré de la forme :

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & & A_{2j} & \\ \vdots & & & & \\ A_{i1} & \vdots & & A_{ij} & \\ \vdots & & & & \end{pmatrix} \text{ où les } A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle$$

- **III.5. Vecteurs propres et valeurs propres**

Le vecteur ket  $|\phi_n\rangle$  est un vecteur propre ou ket propre de l'opérateur A associé à la valeur propre  $a_n$  s'il vérifie l'équation :

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad \text{(Equation aux valeurs propres)}$$

# • Remarques

- Multiplions  $|\phi_n\rangle$  par un scalaire  $\lambda$ , on a :

$$|\psi_n\rangle = \lambda|\phi_n\rangle = |\lambda\phi_n\rangle$$

$$A|\psi_n\rangle = A(|\lambda\phi_n\rangle) = \lambda(|A\phi_n\rangle) \quad \text{car } A \text{ est un opérateur linéaire.}$$

$$A|\psi_n\rangle = A(|\lambda\phi_n\rangle) = \lambda(|a_n\phi_n\rangle) = a_n(\lambda|\phi_n\rangle) = a_n|\lambda\phi_n\rangle$$

- 

Le vecteur  $|\lambda\phi_n\rangle$  est aussi ket propre de  $A$  associé à la même valeur propre  $a_n$ . Pour fixer la valeur de la constante  $\lambda$  et donc la longueur du vecteur, on norme les vecteurs propres à l'unité, c - à - d :

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = \lambda^2\langle\phi_n|\phi_n\rangle = 1$$

La phase n'est toutefois pas fixée car si,  $|\psi_n\rangle = e^{i\theta}|\phi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\psi_n|\psi_n\rangle = \langle\phi_n|\phi_n\rangle$

On dit que les vecteurs propres  $|\phi_n\rangle$  sont connus à une phase globale près.

# • III. 6. Opérateurs adjoints ou conjugués hermitiques

Deux opérateurs  $A$  et  $A^+$  sont dits adjoints l'un de l'autre si la relation suivante est vérifiée :

$$\forall |\psi\rangle \text{ et } |\phi\rangle \in \xi, \quad \langle \psi | A^+ | \phi \rangle = (\langle \phi | A | \psi \rangle)^*$$

Il découle de ce qui précède les relations suivantes :

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

$$\langle \phi | \psi' \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle \quad (1)$$

Prenons le conjugué de (1)

$$\langle \phi | \psi' \rangle^* = (\langle \phi | A | \psi \rangle)^* = \langle \psi | A^+ | \phi \rangle = \langle \psi' | \phi \rangle \quad (\text{d'après la condition d'hermiticité})$$

Par identification, on en déduit :  $\langle \psi' | = \langle \psi | A^+$

On note ainsi que l'opérateur adjoint  $A^+$  est l'opérateur qui n'agit que sur le vecteur bra.

• Dans une base  $\{|e_i\rangle\}$ , on a :

$$\langle e_i | A^+ | e_j \rangle = (\langle e_j | A | e_i \rangle)^* \implies A_{ij}^+ = A^*_{ji}$$

La matrice de  $A^+$  est la *transposée et conjuguée* de  $A$ .

## • III.7. Opérateurs hermitiques

A est un opérateur hermitique s'il est égal à son adjoint :  $A^\dagger = A$ .

D'où  $\forall |\psi\rangle$  et  $|\phi\rangle \in \xi$ ,  $\langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle = (\langle \phi | A | \psi \rangle)^* = \langle \psi | A | \phi \rangle$

Il s'ensuit que les éléments de matrice de A dans une représentation  $\{|e_i\rangle\}$  donnée sont tels que :

$$A_{ij}^\dagger = A_{ji}^* = A_{ij}$$

### • III.7.1. Valeurs propres et vecteurs propres

#### • a. Valeurs propres

Soit  $|\phi_n\rangle$  le vecteur propre de l'opérateur A associé à la valeur propre  $a_n$  :

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad (1)$$

Multiplions cette relation par le vecteur bra

$$\langle \phi_n | \times (1) \quad \Rightarrow \quad \langle \phi_n | A | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_n | \phi_n \rangle \quad (2)$$

Prenons le conjugué de (2) :

$$\langle \phi_n | A | \phi_n \rangle^* = a_n^* \langle \phi_n | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | A^\dagger | \phi_n \rangle \quad (3) \quad \text{d'après la définition de l'opérateur adjoint}$$

Et comme  $A^+ = A \Rightarrow \langle \phi_n | A^+ | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | A | \phi_n \rangle$

•  $(3) = (2) \Rightarrow a_n^* \langle \phi_n | \phi_n \rangle = a_n \langle \phi_n | \phi_n \rangle$

Par identification, on en déduit que :

$$a_n^* = a_n$$

**Conclusion :** Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.

• **b- Vecteurs propres**

Soient  $|\phi_1\rangle$  et  $|\phi_2\rangle$  deux vecteurs propres associés aux valeurs propres distinctes  $a_1$  et  $a_2$  de l'opérateur hermitique A. On a :

$$A|\phi_1\rangle = a_1|\phi_1\rangle \quad (1)$$

$$A|\phi_2\rangle = a_2|\phi_2\rangle \quad (2) \Rightarrow \langle \phi_2 | A^+ = \langle \phi_2 | A = \langle \phi_2 | a_2 = a_2 \langle \phi_2 | \quad (3)$$

Multiplions la relation (1) par le vecteur bra  $\langle \phi_2 |$  et (3) par le vecteur ket  $|\phi_1\rangle$

$$\langle \phi_2 | \times (1) \Rightarrow \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle = a_1 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle \quad (4)$$

$$(3) \times |\phi_1\rangle \Rightarrow \langle \phi_2 | A | \phi_1 \rangle = a_2 \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle \quad (5)$$

$$(4) - (5) \Rightarrow (a_1 - a_2) \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle = 0$$

Et comme  $a_1 \neq a_2$  alors  $|\phi_1\rangle \perp |\phi_2\rangle$

**Conclusion :** Les vecteurs propres d'un opérateur hermitique, associés à des valeurs propres distinctes, sont orthogonaux.

Exemple:

$$A = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & i & -2 \\ -i & \mathbf{0} & -1 \\ \mathbf{0} & 2 & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

Si  $A$  est hermétique :  $A = A^\dagger$  ce qui donne :  $A^\dagger_{ij} = A_{ij} = A^*_{ji}$

### • III.8. Observables

Une observable est un opérateur linéaire et hermitique dont les vecteurs propres (orthonormés  $\langle \phi_i | \phi_j \rangle$ ) obéissent à la relation de fermeture :

$$\sum_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| = 1$$

En d'autres termes, les vecteurs propres d'une observable constituent une base orthonormée. On dit aussi que les vecteurs propres d'une observable forment un ensemble complet.

# Les postulats de la Mécanique Quantique

- Ces postulats fourniront une réponse aux questions suivantes :
- Comment décrire mathématiquement l'état d'un système quantique à un instant donné ?
- Comment prévoir les résultats de la mesure des diverses grandeurs physiques lorsque cet état est donné ?
- Comment trouver l'état du système à un instant quelconque lorsqu'on connaît cet état à un instant donné ?

# I. Les postulats

- **1.1. Etat d'un système physique**

Postulat 1 : A un instant  $t_0$  fixé, l'état d'un système physique est entièrement défini par un vecteur unitaire  $|\psi(t_0)\rangle$  de l'espace des états  $\xi$ .

- **1.2. Grandeurs physiques**

Postulat 2 : A toute grandeur physique mesurable  $\mathcal{A}$  correspond dans l'espace des états  $\xi$ , un opérateur  $A$  qui est une observable.

- Correspondance entre grandeurs physiques mesurables et operateurs

	Grandeur physique	Observable correspondant
Position	$x$	$x$
Impulsion	$P = mv$	$-i\hbar \frac{d}{dx}$
Energie cinétique	$\frac{p^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$
Energie totale	$\frac{p^2}{2m} + V(x)$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$

## • 1.3. Mesure des grandeurs physiques

**Postulat 3 :** Quel que soit l'état du système, les seules valeurs possibles qu'une mesure de la grandeur physique  $\mathcal{A}$  peut donner sont les valeurs propres de l'opérateur  $A$  correspondant.

**Remarque :**  $A$  étant hermitique, une mesure de  $\mathcal{A}$  donnera toujours des valeurs réelles.

**Postulat 4 :** *i)* Lorsqu'on mesure la grandeur physique  $\mathcal{A}$  sur un système dans l'état  $|\psi\rangle$ , la probabilité  $P(a_n)$  pour que le résultat soit la valeur propre non dégénérée  $a_n$  de l'observable  $A$  correspondante est :

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

Où  $A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle$  avec  $|\phi_n\rangle$  vecteur propre de  $A$

$\langle \phi_n | \psi \rangle = c_n$  composantes du vecteur  $|\psi\rangle$  sur la base des kets propres  $\{|\phi_n\rangle\}$



Immédiatement après cette mesure (le système n'ayant pas évolué encore), l'état du système est le vecteur propre  $|\phi_n\rangle$ .

$$|\psi\rangle \xrightarrow{a_n} |\phi_n\rangle$$

ii) Si la valeur propre  $a_n$  est dégénérée  $g_n$  fois,  $A|\phi_n^i\rangle = a_n|\phi_n^i\rangle$ , alors

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

Et l'état du système immédiatement après la mesure est représenté par le vecteur  $|\psi'\rangle$  tel que :

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |\phi_n^i\rangle$$

## Exemple

Soit une observable  $A$  de valeurs propres  $a_1, a_2, a_3$  associées respectivement aux valeurs propres  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$  et  $|\phi_3\rangle$ . On suppose que les valeurs propres  $a_1$  et  $a_2$  sont identiques et l'état du système représenté par  $|\psi\rangle = \frac{1}{2}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle + \frac{1}{2}|\phi_3\rangle$ .

- 1) Quelle est la probabilité pour que le résultat de la mesure de  $A$  donne la valeur propre  $a_1$  ?
- 2) Quel est l'état du système immédiatement après la mesure ?

Solution :

$$1) a_1 \rightarrow |\phi_1\rangle, a_2 \rightarrow |\phi_2\rangle, a_3 \rightarrow |\phi_3\rangle$$

$a_1 = a_2 = a$ ,  $a_1$  est dégénérée 2 fois. Elle est associée à 2 vecteurs propres différents :

$$|\phi_1\rangle = |\phi_1^1\rangle \text{ et } |\phi_2\rangle = |\phi_2^2\rangle \quad \Rightarrow \quad P(a_1 = a_2 = a) = |\langle\phi_1|\psi\rangle|^2 + |\langle\phi_2|\psi\rangle|^2$$

2) L'état du système immédiatement après la mesure est représenté par le vecteur  $|\psi'\rangle$  tel que :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{a_1} |\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\langle\phi_1^1|\psi\rangle|^2 + |\langle\phi_2^2|\psi\rangle|^2}} \left( \frac{1}{2}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle \right)$$

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}} \left( \frac{1}{2}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_2\rangle \right) \quad |\psi'\rangle \text{ est une combinaison linéaire normée } |\phi_1\rangle \text{ et } |\phi_2\rangle$$

## • 1.4. Evolution des systèmes dans le temps

**Postulat 5 :** L'évolution dans le temps de l'état d'un système physique est régie par l'équation de Schrödinger (généralisée ou dépendant du temps).

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

où  $H$  est l'hamiltonien, observable associée à l'énergie totale du système.

### • 1.4.1. Cas des systèmes conservatifs

Ce sont des systèmes dont l'hamiltonien  $H$  ne dépend pas explicitement du temps. L'énergie totale de tels systèmes se conserve au cours du temps.

Soit  $|\phi_n\rangle$  le vecteur propre de  $H$  associé à la valeur propre  $E_n$ . On a :

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

Les vecteurs propres de  $H$  forment une base complète sur  $\xi$ , c-à-d :

$$\sum_i |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1$$

**Alors quelle est l'expression de  $|\psi(t)\rangle$  à un instant  $t$  ?**

$|\psi(t)\rangle$  peut se développer de façon unique sur la base des kets  $|\phi_n\rangle$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi(t)\rangle \quad \text{avec} \quad c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t)\rangle \\ &= \sum_n c_n(t) |\phi_n\rangle \quad (1) \end{aligned}$$

Comme  $H$  est indépendante du temps, alors  $|\phi_n\rangle$  est aussi indépendante du temps. La dépendance de  $|\psi(t)\rangle$  du temps se trouve donc dans  $c_n(t)$ .

$$|\psi(t)\rangle \text{ vérifie l'équation de Schrödinger : } i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (2)$$

Multiplions la par le vecteur bra  $\langle \phi_n |$

$$\langle \phi_n | \times (2) \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle \phi_n | \psi(t)\rangle = \langle \phi_n | H | \psi(t)\rangle \quad (3)$$

Or  $\langle \phi_n | H = E_n \langle \phi_n |$  car  $H$  est une observable et  $c_n(t) = \langle \phi_n | \psi(t)\rangle$ .

$$(3) \quad \Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle \phi_n | \psi(t) \rangle = E_n \langle \phi_n | \psi(t) \rangle$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t)$$

$$\frac{dc_n(t)}{c_n(t)} = -\frac{i}{\hbar} E_n dt$$

$$\int_{t_0}^t \frac{dc_n(t)}{c_n(t)} = -\frac{i}{\hbar} E_n \int_{t_0}^t dt \quad \Rightarrow \quad c_n(t) = c_n(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)}$$

Ainsi à l'instant  $t$ , le système sera dans l'état  $|\psi(t)\rangle$

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

A l'instant initial  $t = t_0$ ,  $|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |\phi_n\rangle$

**Remarque :**

Pour trouver  $|\psi(t)\rangle$  connaissant  $|\psi(t_0)\rangle$  :

- On développe  $|\psi(t_0)\rangle$  sur la base des kets propres  $|\phi_n\rangle$  de  $H$  :

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |\phi_n\rangle \text{ avec } c_n(t_0) = \langle \phi_n | \psi(t_0) \rangle \text{ les composantes de } |\psi(t_0)\rangle \text{ sur la base } \{|\phi_n\rangle\}.$$

- On obtient ensuite  $|\psi(t)\rangle$  en multipliant chaque coefficient  $c_n(t_0)$  par le facteur  $e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)}$ .

# II. Mesures en mécanique quantique

- **II.1. Valeur moyenne d'une mesure**

En en mécanique quantique, on définit la valeur moyenne de l'observable A dans l'état  $|\psi\rangle$  par :

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

$\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$  représente aussi l'élément de matrice de A sur cet état.

C'est la moyenne des résultats obtenus en effectuant un grand nombre N de mesures de l'observable A sur des systèmes tous dans l'état  $|\psi\rangle$ . Elle donne l'ordre de grandeur des valeurs de l'observable A dans l'état  $|\psi\rangle$ .

- Quelle autre formulation de  $\langle A \rangle_{|\psi\rangle}$  ?

Soient  $|\phi_n\rangle$  les vecteurs propres de A associés aux valeurs propres distinctes  $a_n$ .

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad (1)$$

Les kets propres  $|\phi_n\rangle$  forment une base complète, donc obéissent à la relation de fermeture :

$$\sum_i |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = 1$$

Injectons cette relation dans l'expression de la moyenne. On a :

$$\langle A \rangle_{|\psi\rangle} = \sum_n \langle \psi | A | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle$$

D'après la relation (1), on a :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_{|\psi\rangle} &= \sum_n \langle \psi | A | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \psi | a_n | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \psi \rangle \\ &= \sum_n a_n c_n^* c_n \\ &= \sum_n a_n |c_n|^2 \\ \langle A \rangle_{|\psi\rangle} &= \sum_n a_n P(a_n) \end{aligned}$$

## Exemple

Soit une observable  $A$  de valeurs propres  $a_1$  et  $a_2$  dont les probabilités de mesure sont respectivement  $P(a_1)$  et  $P(a_2)$ . Sa valeur moyenne est alors :

$$\begin{aligned}\langle A \rangle_{|\psi\rangle} &= a_1 P(a_1) + a_2 P(a_2) \\ &= 1 \times \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \times \frac{1}{2}\end{aligned}$$

- **II.2. Ecart type (Ecart quadratique moyen)**

Lorsqu'on effectue  $N$  mesures de la grandeur physique  $\mathcal{A}$ , les résultats vont se disperser autour de la valeur moyenne. Cette dispersion est caractérisée par l'écart type ou Ecart quadratique moyen.

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle$$

Cette quantité est appelée variance

l'écart type est :  $\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$

•  
Lorsque le système se trouve dans l'état  $|\psi\rangle$ , on a :

$$\begin{aligned}\langle(\Delta A)^2\rangle_{|\psi\rangle} &= \langle\psi|(A - \langle A\rangle)^2|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|(A^2 - 2A\langle A\rangle + \langle A\rangle^2)|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|A^2|\psi\rangle - 2\langle\psi|A|\psi\rangle\langle A\rangle + \langle\psi|\langle A\rangle^2|\psi\rangle \\ &= \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle\langle A\rangle + \langle A\rangle^2 \\ &= \langle A^2\rangle - 2\langle A\rangle^2 + \langle A\rangle^2 \\ \langle(\Delta A)^2\rangle_{|\psi\rangle} &= \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2\end{aligned}$$

**Remarque :** Ainsi, on montre que si le système est dans un état propre  $|\phi_n\rangle$  de l'observable  $A$ , alors  $\langle(\Delta A)^2\rangle = 0$  (à démontrer).

- **II.3. Mesure simultanée de deux grandeurs physiques**
- En mécanique classique, la mesure précise et simultanée de 2 grandeurs physiques ne pose pas véritablement de problème.
- En effet, l'observation de la trajectoire d'un projectile permet d'avoir sa vitesse et sa position.
- En mécanique quantique, cela n'est possible que si les 2 opérateurs satisfont certaines conditions.
- La mesure simultanée de deux grandeurs physiques  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$ , associées respectivement aux observables  $A$  et  $B$ , n'est possible que si le système est dans un état propre  $|\phi_n\rangle$  à la fois de  $A$  et  $B$ .

En effet, quelles que soient  $a_n$  et  $b_n$  les valeurs propres associées à  $A$  et  $B$ , il existe au moins un vecteur propre  $|\phi_n\rangle$  pour lequel :

- Une mesure de  $A$  donnera à coup sûr  $a_n$  ;
- Une mesure de  $B$  donnera à coup sûr  $b_n$ .

## • Quelle est la particularité de A et B ?

Supposons que l'on veuille mesurer simultanément, donc possédant un système complet de vecteurs propres communs  $\{|\phi_n\rangle\}$ . On a :

$$A|\phi_n\rangle = a_n|\phi_n\rangle \quad (1)$$

$$B|\phi_n\rangle = b_n|\phi_n\rangle \quad (2)$$

Multiplions respectivement les relations (2) par A et (1) par B. On obtient :

$$A \times (2) \Rightarrow AB|\phi_n\rangle = b_n(A|\phi_n\rangle) = b_n a_n |\phi_n\rangle \quad (3)$$

$$B \times (1) \Rightarrow BA|\phi_n\rangle = a_n(B|\phi_n\rangle) = a_n b_n |\phi_n\rangle \quad (4)$$

En faisant la soustraction (3) et (4), on aboutit à :

$$[AB - BA]|\phi_n\rangle = 0$$

$$[A, B]|\phi_n\rangle = 0$$

Et comme  $|\phi_n\rangle \neq 0$ , alors  $[A, B] = 0$

En d'autres termes, les observables A et B commutent. On dit aussi qu'elles sont compatibles.

**Réciproquement** : On montre que si A et B commutent, alors ils possèdent en commun un système complet de vecteurs propres

**Conclusion** : Pour mesurer simultanément deux observables sur un système, il faut qu'elles commutent c'est à dire qu'elles possèdent un ensemble complet de vecteurs propres communs.

## • II.4. Relation d'incertitude d'Heisenberg

Soient deux observables A et B qui commutent pas, c - à - d :

$$[A, B] = ic \text{ où } c \in \mathbb{R}^*$$

Introduisons les observables suivants :

$$\hat{A} = A - \langle A \rangle$$

$$\hat{B} = B - \langle B \rangle$$

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = [A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle] \\ &= [A, B] - [A, \langle B \rangle] - [\langle A \rangle, B] + [\langle A \rangle, \langle B \rangle] \\ &= [A, B] - (A\langle B \rangle - \langle B \rangle A) - (\langle A \rangle B - B\langle A \rangle) + (\langle A \rangle\langle A \rangle - \langle B \rangle\langle B \rangle) \end{aligned}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [A, B] = ic$$

Les écart-types de A et B sont :

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle$$

$$(\Delta B)^2 = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 = \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{B}^2 \rangle$$

Or

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} &= \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} & (1) \Rightarrow & \left| \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{ic}{2} \right\rangle \right|^2 \leq \langle \hat{A}^2 \rangle \cdot \langle \hat{B}^2 \rangle \\ &= \frac{1}{2} [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} & & \left| \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle \right|^2 + \frac{c^2}{4} \leq \langle \hat{A}^2 \rangle \cdot \langle \hat{B}^2 \rangle \\ &= \frac{ic}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} & & \end{aligned}$$

• Et comme  $(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle$  et  $(\Delta B)^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle$ , on a :

$$\left| \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle \right|^2 + \frac{c^2}{4} \leq (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2$$

Cette relation est aussi vraie pour :

$$\frac{c^2}{4} \leq (\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2$$

$$\frac{c}{2} \leq \Delta A \cdot \Delta B$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{c}{2} \quad \text{C'est le principe d'incertitude d'Heisenberg.}$$

**Conclusion :** Lorsque deux observables ne commutent pas (ou ne sont pas compatibles), il existe une relation d'incertitude qui lie les précisions avec lesquelles elles peuvent être déterminées.

**Généralisation :** Les précisions de mesure de deux observables quelconques A et B sont liées par la relation :

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

## • II.5. Evolution dans le temps de la valeur moyenne

Soient  $A$  une observable et  $|\psi(t)\rangle$  l'état du système. La valeur moyenne de l'observable  $A$  à l'instant  $t$  est :

$$\langle A \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

La dépendance en  $t$  provient de :

- $|\psi(t)\rangle$ , évolution en fonction de  $t$  par l'équation de Schrödinger ;
- $A$  peut dépendre explicitement du temps, ce qui ajouterait une cause supplémentaire de variation de  $\langle A \rangle(t)$  avec  $t$ .

Dérivons l'expression de la valeur moyenne  $\langle A \rangle(t)$ . On a :

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{dA}{dt} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \frac{d}{dt} [ | \psi(t) \rangle ] \quad (2)$$

Or l'équation de Schrödinger est :

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

Prenons le conjugué hermitique de cette équation.

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

Ainsi la relation (2) devient donc :

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

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} [A, H] + \left\langle \frac{dA}{dt} \right\rangle \quad (3)$$

Si A ne dépend pas explicitement du temps (système isolé), alors :

$$\frac{dA}{dt} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} [A, H] \quad (4)$$

## • II.5.1. Application : Théorème d'Ehrenfest

Considérons une particule plongée dans un potentiel scalaire et stationnaire (indépendant du temps)  $V(x)$ . On a :

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

a) Si  $A = x$  (Opérateur position)

$$(4) \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{i\hbar} [x, H] \quad (5)$$

Calculons  $[x, H]$

$$[x, H] = \left[ x, \frac{p^2}{2m} + V(x) \right] = \left[ x, \frac{p^2}{2m} \right] + [x, V(x)]$$

**Remarque :**

- $[A, F(A)] = 0$
- Si  $[A, B] = 0$   $[A, F(B)] = 0$

La relation précédente devient donc :

$$\begin{aligned} [x, H] &= \left[ x, \frac{p^2}{2m} \right] = \frac{1}{2m} [x, p^2] = \frac{1}{2m} [x, P \cdot P] \\ &= \frac{1}{2m} (P[x, P] + [x, P]P) \end{aligned}$$

Or  $[x, P] = i\hbar$  (à démontrer), donc :

$$[x, H] = \frac{1}{2m} (i\hbar P + i\hbar P) = \frac{i\hbar}{m} P$$

**Remarque :**  $[x, F(P)] = i\hbar F'(P)$

Finalement, la relation (5) donne :

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{1}{m}\langle P \rangle \quad \Rightarrow \quad m \frac{d}{dt}\langle x \rangle = \langle P \rangle \quad (6)$$

C'est la relation classique de la quantité de mouvement = masse  $\times$  vitesse

**b) Si  $A = P$**  (Opérateur quantité de mouvement)

$$(4) \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} [P, H] \quad (7)$$

Calculons  $[P, H]$

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

Appliquons  $[P, V(x)]$  à la fonction  $f(x)$ . On a :

$$[P, V(x)]f(x) = PV(x)f(x) - V(x)Pf(x) \quad \text{avec} \quad P = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

$$\begin{aligned} [P, V(x)]f(x) &= -i\hbar \frac{d}{dx} [V(x)f(x)] + i\hbar V(x) \frac{d}{dx} f(x) \\ &= -i\hbar \left( \frac{dV(x)}{dx} f(x) + V(x) \frac{df(x)}{dx} \right) + i\hbar V(x) \frac{d}{dx} f(x) \end{aligned}$$

$$[P, V(x)]f(x) = -i\hbar \frac{dV(x)}{dx} f(x)$$

$$\text{On en déduit que : } [P, V(x)] = -i\hbar \frac{dV(x)}{dx} = -i\hbar V'(x)$$

**Remarque** :  $[P, G(x)] = -i\hbar G'(x)$

Finalement, la relation (7) devient :

$$\frac{d}{dt}\langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle -i\hbar \frac{dV(x)}{dx} \rangle \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt}\langle P \rangle = \langle \frac{dV(x)}{dx} \rangle \quad (8)$$

C'est la relation classique : la force dérive d'un potentiel.

Les relations (6) et (8) constituent le **théorème d'Ehrenfest**. Elles établissent une correspondance entre la mécanique quantique et la mécanique classique.

En effet, la mécanique quantique redonne les lois de la mécanique classique quand on ne considère que les valeurs moyennes, c'est à dire quand on ignore les détails du comportement microscopique du système étudié.

## II.5.2- Constante du mouvement

Lorsque  $A$  ne dépend pas explicitement du temps et commute avec  $H$ , on a :

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dA}{dt} = 0 \\ [A, H] = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = 0$$

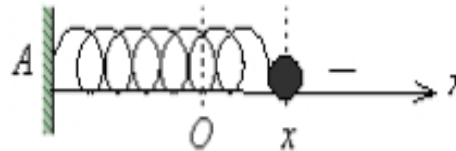
Donc, quel que soit l'état  $|\psi(t)\rangle$  du système physique, la valeur moyenne de  $A$  n'évolue pas au cours du temps. On dit que  $A$  est une constante du mouvement.

# Chapitre 5. L'oscillateur harmonique

- En mécanique quantique, l'oscillateur harmonique joue un rôle important dans la description d'un ensemble de particules identiques se trouvant toutes dans le même état quantique.
- De plus, l'oscillateur harmonique constitue un exemple d'application simple et pédagogique du formalisme général de la mécanique quantique

# • I. Rappel de mécanique classique

L'oscillateur harmonique est constitué par une particule de masse  $m$ , soumise à une force de rappel proportionnelle à l'élongation :  $F = -kx$  ( $x$  = distance par rapport à la position d'équilibre).



Le mouvement d'oscillation de la particule suivant l'axe (Ox) obéit à l'équation :

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0 \quad \text{avec} \quad \omega^2 = \frac{k}{m}$$

Et la solution générale est de la forme :  $x = x_0 \cos(\omega t + \varphi)$

La particule est donc animée d'un mouvement oscillatoire sinusoïdal d'amplitude  $x_0$ , de pulsation  $\omega$  et de phase  $\varphi$ .  $x_0$  et  $\varphi$  étant déterminés par les conditions initiales.

L'énergie potentielle est telle que :

$$F = -\frac{dV(x)}{dx} = -kx \quad \Rightarrow \quad V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

L'énergie totale est donc :

$$\begin{aligned} E = \frac{p^2}{2m} + V(x) &= \frac{1}{2}m \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \\ &= \frac{1}{2} m\omega^2 x_0 \sin^2(\omega t + \varphi) + \frac{1}{2} m\omega^2 x_0 \cos^2(\omega t + \varphi) \\ &= \frac{1}{2} m\omega^2 x_0 \end{aligned}$$

L'énergie totale varie avec l'amplitude de l'oscillation  $x_0$  et peut prendre toute valeur  $E \geq 0$ .

## • II-L 'oscillateur harmonique en mécanique quantique

En MQ, pour accéder à l'énergie totale du système, il faut mesurer la grandeur physique associée à l'observable H. En d'autres termes, il faut résoudre l'équation de Schrödinger pour rechercher les états stationnaires de la particule se déplaçant dans le potentiel  $V(x)$ .

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (1) \quad \text{avec} \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}mX^2$$

Considérons les opérateurs  $\hat{X}$  et  $\hat{P}$  tels que :

$$\left. \begin{aligned} \hat{X} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\ \hat{P} &= \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} P \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} [\hat{X}, \hat{P}] &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \times \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} [X, P] \\ &= \frac{1}{\hbar} [X, P] = \frac{1}{\hbar} \times i\hbar = i \end{aligned} \right.$$

Alors l'hamiltonien se met sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= \frac{m\omega\hbar}{2m} \hat{P}^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} \hat{X}^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2) \end{aligned}$$

Avec

$$H = \hbar\omega \hat{H}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{P}^2 + \hat{X}^2)$$

L'équation (1) devient donc :

$$\hbar\omega \hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad (1)'$$

Nous allons donc chercher les solutions de l'équation aux valeurs propres réduite :

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle$$

Comme l'opérateur  $\hat{H}$  est une somme de deux carrés, on peut le factoriser en tenant compte de la non commutativité des observables  $\hat{X}$  et  $\hat{P}$ . On aura :

$$\begin{aligned} \frac{\hat{X}^2 + \hat{P}^2}{2} &= \left( \frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} \right) + \frac{i}{2} \hat{P}\hat{X} - \frac{i}{2} \hat{X}\hat{P} \\ &= \left( \frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}} \right) - \frac{i}{2} [\hat{X}, \hat{P}] \end{aligned}$$

Par souci de simplifier considérablement la recherche des valeurs propres et des états propres de  $\hat{H}$ , on introduit ainsi de nouveaux opérateurs en posant :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

Calculons  $aa^+$  et  $a^+a$

$$\begin{aligned} aa^+ &= \frac{1}{2}(\hat{X} + i\hat{P})(\hat{X} - i\hat{P}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 - i\hat{X}\hat{P} + i\hat{P}\hat{X} + \hat{P}^2) &&= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - i[\hat{X}, \hat{P}]) \quad \text{or} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i \\ &= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - i[\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}]) &&aa^+ = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + 1) = \hat{H} + \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2)$$

De même, on montre que :

$$a^+a = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1) = \hat{H} - \frac{1}{2} \quad (3)$$

En faisant (2) – (3), on obtient la relation

$$aa^+ - a^+a = [a, a^+] = 1 \quad (4)$$

On introduit l'opérateur défini par :  $\mathbf{N} = a^+a$

Contrairement à  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{a}^+$ ,  $\mathbf{N}$  est hermitique car :

$$\mathbf{N}^+ = (a^+a)^+ = a^+(a^+)^+ = a^+a = \mathbf{N}$$

Donc ses valeurs propres sont réelles et ses vecteurs propres sont orthogonaux.

$$(3) \Rightarrow \left. \begin{aligned} \hat{H} &= a^+a + \frac{1}{2} \\ &= N + \frac{1}{2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow H = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (5)$$

avec  $H = \hbar\omega\hat{H}$

Calculons les Commutateurs de  $\mathbf{N}$  avec  $\mathbf{a}$  et  $\mathbf{a}^+$

$$[\mathbf{N}, \mathbf{a}] = [a^+a, \mathbf{a}] = a^+[a, \mathbf{a}] + [a^+, \mathbf{a}]a = -a$$

$$[\mathbf{N}, \mathbf{a}^+] = [a^+a, \mathbf{a}^+] = a^+[a, \mathbf{a}^+] + [a^+, \mathbf{a}^+]a = a^+$$

- De ces deux relations, on peut tirer :

$$[N, a] = Na - aN = -a \quad \Rightarrow \quad Na = a(N-1) \quad (6)$$

$$[N, a^+] = Na^+ - a^+N = a^+ \quad \Rightarrow \quad Na^+ = a^+(N+1) \quad (7)$$

- **II.1. Valeurs propres de l'hamiltonien**

Les relations (1) et (1)' donnent :

$$H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (1)$$

$$(1)' \quad \Rightarrow \quad \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right) |\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (8)$$

Les valeurs propres de H sont donc celles N et vice versa. Ainsi, l'étude de l'oscillateur harmonique va être basée sur l'utilisation des opérateurs a, a<sup>+</sup> et N. Soient n et |φ<sub>n</sub>⟩ les valeurs propres et vecteurs propres de N. On a :

$$N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle \quad (9)$$

## • II. 2. Valeurs propres de N

Multiplions (9) par le vecteur bra  $\langle \phi_n |$

$$\left. \begin{aligned} \langle \phi_n | \times (1) &\Rightarrow \langle \phi_n | N | \phi_n \rangle = n \langle \phi_n | \phi_n \rangle = n \\ &\langle \phi_n | N | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | a^+ a | \phi_n \rangle \\ &= \langle a \phi_n | a \phi_n \rangle \\ &= \|a | \phi_n \rangle\|^2 \geq 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow n \geq 0$$

Les valeurs propres  $n$  de  $N$  sont donc positives ou nulles.

$$\text{Si } n=0 \text{ alors } \|a | \phi_0 \rangle\|^2 = 0 \Rightarrow a | \phi_0 \rangle = 0 \quad (10)$$

Car la norme d'un vecteur est nulle si et seulement si le vecteur est lui-même nul

Multiplions (10) par l'opérateur  $a^+$ .

$$a^+(10) \Rightarrow a^+ a | \phi_0 \rangle = N | \phi_0 \rangle = 0 | \phi_0 \rangle = 0$$

$n = 0$  appartient à la suite des valeurs propres entières, positives ou nulles possibles de  $N$ .

Les valeurs  $n = 0, 1, 2, \dots$  sont les valeurs propres associés à  $N$ , d'où l'appellation **d'opérateur Nombre**.

Et lorsque l'équation  $N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$  est vérifiée, alors on a :

$$H|\phi_n\rangle = \hbar\omega\left(N + \frac{1}{2}\right)|\phi_n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \Rightarrow E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (11)$$

L'énergie de l'oscillateur harmonique est donc quantifiée et ne peut pas prendre n'importe quelle valeur. De plus, sa plus faible valeur qui correspond à l'état fondamental ( $n = 0$ ) n'est pas nulle mais égale à  $\frac{\hbar\omega}{2}$ .

A partir des relations (6) et (9), on peut obtenir :

$$N(a|\phi_n\rangle) = Na|\phi_n\rangle = a(N - 1)|\phi_n\rangle = (n - 1)(a|\phi_n\rangle) \quad (12)$$

Donc le vecteur  $a|\phi_n\rangle$  est vecteur propre de  $N$  associée à la valeur propre  $n-1$ . On peut dire alors que  $a|\phi_n\rangle$  est proportionnel à  $|\phi_{n-1}\rangle$ , soit

$$a|\phi_n\rangle = \lambda|\phi_{n-1}\rangle$$

Appliquons successivement l'opérateur  $N$  aux vecteurs  $a^k|\phi_n\rangle$

$$\left. \begin{aligned} [N, a^2]|\phi_n\rangle &= (Na^2 - a^2N)|\phi_n\rangle \\ &= (a[N, a] + [N, a]a)|\phi_n\rangle \\ &= -2a^2|\phi_n\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} N(a^2|\phi_n\rangle) &= a^2(N - 2)|\phi_n\rangle \\ &= a^2(n - 2)|\phi_n\rangle \\ &= (n - 2)(a^2|\phi_n\rangle) \end{aligned} \right.$$

Le vecteur  $a^2|\phi_n\rangle$  est vecteur propre de  $N$  associée à la valeur propre  $n-2$ .

$$\begin{aligned}
N(a^2|\phi_n\rangle) &= a^2(n-2)|\phi_n\rangle \\
&\vdots \\
N(a^k|\phi_n\rangle) &= a^2(n-k)|\phi_n\rangle \quad (13)
\end{aligned}$$

Par application successive de  $a$  sur le vecteur  $|\phi_n\rangle$ , on génère les vecteurs propres  $|\phi_{n-k}\rangle$   
De même on a :

$$Na^+|\phi_n\rangle = N(a^+|\phi_n\rangle) = a^+(N+1)|\phi_n\rangle = (n+1)(a^+|\phi_n\rangle) \quad (14)$$

Le vecteur  $a^+|\phi_n\rangle$  est vecteur propre de  $N$  associée à la valeur propre  $n+1$ . On peut écrire que  $a^+|\phi_n\rangle$  est proportionnel à  $|\phi_{n+1}\rangle$ , soit

$$a^+|\phi_n\rangle = \beta|\phi_{n+1}\rangle$$

En appliquant successivement l'opérateur  $N$  aux vecteurs  $a^{+m}|\phi_n\rangle$

$$\left. \begin{aligned}
[N, a^{+2}]|\phi_n\rangle &= (Na^{+2} - a^{+2}N)|\phi_n\rangle \\
&= (a^{+2}[N, a^{+2}] + [N, a^{+2}]a^{+2})|\phi_n\rangle \\
&= 2a^{+2}|\phi_n\rangle
\end{aligned} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned}
N(a^{+2}|\phi_n\rangle) &= a^{+2}(N+2)|\phi_n\rangle \\
&= a^{+2}(n+2)|\phi_n\rangle \\
&= (n+2)(a^{+2}|\phi_n\rangle)
\end{aligned} \right.$$

Le vecteur  $a^{+2}|\phi_n\rangle$  est vecteur propre de  $N$  associé à la valeur propre  $n+2$ .

$$\begin{aligned}
N(a^{+2}|\phi_n\rangle) &= a^{+2}(n+2)|\phi_n\rangle \\
&\vdots \\
N(a^{+m}|\phi_n\rangle) &= a^{+m}(n+m)|\phi_n\rangle \quad (15)
\end{aligned}$$

Par application successive de  $a^+$  sur le vecteur  $|\phi_n\rangle$ , on génère les vecteurs propres  $|\phi_{n+m}\rangle$ .

D'où le tableau suivant :

Valeurs propres	Vecteurs propres
$n + m$	$ \phi_{n+m}\rangle$
.	.
.	.
$n + 1$	$ \phi_{n+1}\rangle$
$n$	$ \phi_n\rangle$
$n - 1$	$ \phi_{n-1}\rangle$
.	.
.	.
$n - k$	$ \phi_{n-k}\rangle$

Si l'on part d'un état propre  $|\phi_n\rangle$  de H correspondant à la valeur propre :

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

- On passe par l'application de l'opérateur  $a$  à un vecteur propre associé à la valeur propre :

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

Il y a annihilation d'un quantum d'énergie.

## • II.3. Interprétation des opérateurs $a$ et $a^+$

Si l'on part d'un état propre  $|\phi_n\rangle$  de  $H$  correspondant à la valeur propre :

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

- On passe par l'application de l'opérateur  $a$  à un vecteur propre associé à la valeur propre :

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

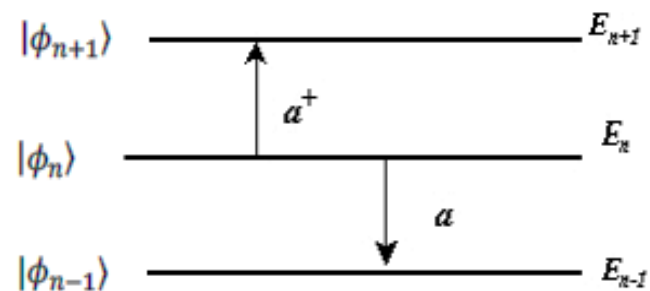
Il y a annihilation d'un quantum d'énergie.

- L'application de  $a^+$  donne l'énergie :

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

Il y a création d'un quantum d'énergie.

Leur action sur un vecteur propre de  $N$  fait disparaître ou au contraire apparaître un quantum d'énergie :



D'où l'appellation :

- d'opérateur annihilation pour  $\mathbf{a}$  ;
- opérateur création pour  $\mathbf{a}^+$ .

## • II.4. Expressions des vecteurs $a|\phi_n\rangle$ et $a^+|\phi_n\rangle$

Le vecteur  $a|\phi_n\rangle$  est vecteur propre de  $N$  associée à la valeur propre  $n-1$ , avec :

$$a|\phi_n\rangle = \lambda|\phi_{n-1}\rangle$$

$a|\phi_n\rangle$  est normé

$$\left. \begin{aligned} \langle\phi_n|a^+a|\phi_n\rangle &= \langle\phi_{n-1}|\lambda^*\lambda|\phi_{n-1}\rangle = |\lambda|^2\langle\phi_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle = |\lambda|^2 \\ &= \langle\phi_n|N|\phi_n\rangle = n\langle\phi_n|\phi_n\rangle = n \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} |\lambda|^2 = n \\ \lambda = \sqrt{n} \end{cases}$$

$$a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle \quad (16)$$

De même,  $a^+|\phi_n\rangle = \beta|\phi_{n+1}\rangle$  est vecteur propre de  $N$  associée à la valeur propre  $n+1$ .

$$\langle\phi_n|aa^+|\phi_n\rangle = |\beta|^2\langle\phi_{n+1}|\phi_{n+1}\rangle = |\beta|^2$$

- Or  $[a, a^+] = aa^+ - a^+a = 1 \implies aa^+ = a^+a + 1 = N + 1$

$$\langle \phi_n | aa^+ | \phi_n \rangle = \langle \phi_n | N + 1 | \phi_n \rangle = (n + 1) \langle \phi_n | \phi_n \rangle = n + 1$$

On obtient :

$$|\beta|^2 = n + 1 \implies \beta = \sqrt{n + 1}$$

$$\text{D'où } a^+ | \phi_n \rangle = \sqrt{n + 1} | \phi_{n+1} \rangle \quad (17)$$

- **II.1.5. Détermination de l'état  $|\phi_n\rangle$**

Connaissant l'état  $|\phi_0\rangle$ , état fondamental associé à la valeur propre  $n = 0$ , on peut construire les états excités de l'oscillateur harmonique.

A partir de la relation (17), on a :

$$a^+ | \phi_0 \rangle = \sqrt{1} | \phi_1 \rangle$$

$$(a^{+2}) | \phi_0 \rangle = a^+ (a^+ | \phi_0 \rangle) = \sqrt{1} a^+ | \phi_1 \rangle = \sqrt{1} \cdot \sqrt{2} | \phi_2 \rangle = \sqrt{1 \cdot 2} | \phi_2 \rangle$$

$$(a^{+3}) | \phi_0 \rangle = a^+ (a^{+2} | \phi_0 \rangle) = \sqrt{1} \cdot \sqrt{2} (a^+ | \phi_2 \rangle) = \sqrt{1} \cdot \sqrt{2} \cdot \sqrt{3} | \phi_3 \rangle = \sqrt{1 \cdot 2 \cdot 3} | \phi_3 \rangle$$

- $(a^{+n})|\phi_0\rangle = \sqrt{n!}|\phi_n\rangle$

On peut ainsi obtenir tous les autres états  $|\phi_n\rangle$  à partir de  $|\phi_0\rangle$ , soit :

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^{+n})|\phi_0\rangle \quad (18)$$

- **II.2. Fonctions d'onde associées aux états stationnaires de l'hamiltonien**

On cherche les fonctions propres  $\phi_n(x)$  appartenant à  $\mathcal{F}$  et représentant les états propres  $|\phi_n\rangle$  de H.

Pour ce faire, on remplace les opérateurs X et P respectivement par  $x$  et  $-i\hbar\frac{d}{dx}$  dans les expressions de  $a$  et  $a^+$ .

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}} \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right]$$

On pose :

$$\left. \begin{aligned} y &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \\ dy &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} dx \end{aligned} \right\} \Rightarrow dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} dy$$
$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( y + \frac{d}{dy} \right) \quad \text{et} \quad a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( y - \frac{d}{dy} \right)$$

## • II.2.1. Fonction propre de l'état fondamental

Cette fonction notée  $\phi_0(x)$  est associée à la valeur propre  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$  de l'hamiltonien. Elle s'obtient à partir de la relation (10) :

$$a|\phi_0\rangle = 0$$

Dans l'espace  $\mathcal{F}$ , cette équation devient donc :

$$a\phi_0(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( y + \frac{d}{dy} \right) \phi_0(y) = 0 \quad \Rightarrow \quad \left( y + \frac{d}{dy} \right) \phi_0(y) = 0$$
$$y\phi_0(y) + \frac{d\phi_0(y)}{dy} = 0$$
$$\frac{d\phi_0(y)}{\phi_0(y)} = -y dy$$

On obtient une équation différentielle du 1<sup>er</sup> ordre dont la solution générale est :

$$\phi_0(y) = A_0 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Où  $A_0$  est une constante de normalisation

La fonction d'onde  $\phi_0(y)$  est physiquement acceptable si elle est normalisable :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi_0(y)|^2 dy = |A_0|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} |A_0|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad A_0 = \pi^{-\frac{1}{4}}$$

D'où :

$$\phi_0(y) = \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{y^2}{2}}$$

Ensuite, on construit les fonctions d'onde des états excités par application successive de  $a^+$  sur  $\phi_0(y)$ . Ainsi, on a :

$$\phi_1(y) = a^+ \phi_0(y) = A_1 \left( y - \frac{d}{dy} \right) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\phi_2(y) = a^+ \phi_1(y) = (a^+)^2 \phi_0(y) = A_2 \left( y - \frac{d}{dy} \right)^2 e^{-\frac{y^2}{2}}$$

$$\phi_n(y) = a^+ \phi_{n-1}(y) = (a^+)^n \phi_0(y) = A_n \left( y - \frac{d}{dy} \right)^n e^{-\frac{y^2}{2}}$$

On remarque que chaque dérivation de la fonction  $e^{-\frac{y^2}{2}}$  par rapport à  $y$  introduit un facteur  $y$  supplémentaire.

La fonction  $\phi_n(y)$  est donc égale au produit d'un polynôme de degré  $n$  par la gaussienne  $e^{-\frac{y^2}{2}}$ . Ce polynôme qu'on note  $H_n$  est appelé polynôme d'Hermite et est de la forme :

$$H_n(u) = (-1)^n e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

Les trois premiers polynômes sont :

$$H_0(u) = 1$$

$$H_1(u) = 2u$$

$$H_2(u) = 4u^2 - 2$$