MECANIQUE QUANTIQUE

COURS 4 – LES PRINCIPES DE LA MECANIQUE QUANTIQUE

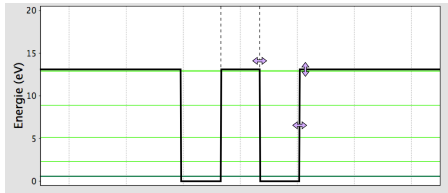
QUENTIN GLORIEUX

3P001 – UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE 2015-2016

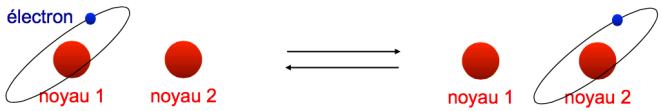
DOUBLE PUITS

Paramètres du problème :

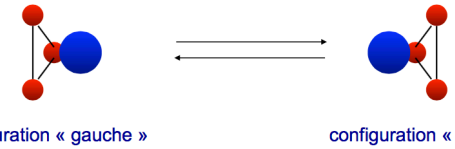
- Largeur d'un puits
- Hauteur d'un puits
- Ecart entre les deux puits



- Modélisation de la liaison chimique :

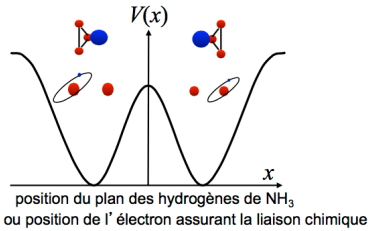


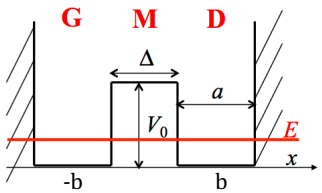
- Inversion de la molécule d'ammoniac



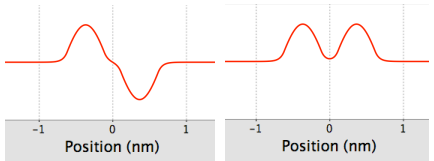
MODELISATION DU DOUBLE PUITS

On s'intéresse aux niveaux d'énergie $E < V_0$



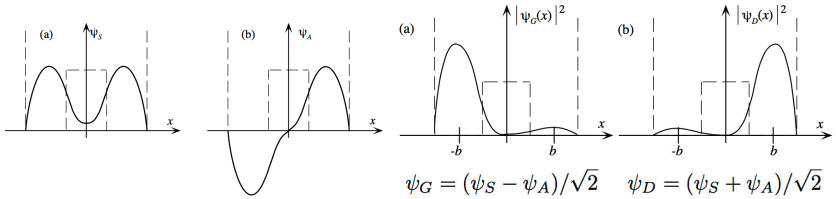


On cherche les solutions sous la forme ci-contre avec des solutions paires et des solutions impaires .



PHÉNOMÈNE D'INVERSION

On a trouvé les solutions symétriques et anti-symétriques (ce sont les états propres de l'énergie). On peut les combiner linéairement :



$\psi_G = (\psi_S - \psi_A)/\sqrt{2}$ $\psi_D = (\psi_S + \psi_A)/\sqrt{2}$

Cette combinaison linéaire va donc évoluer dans le temps !!!

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_S(x)\,e^{-iE_St/\hbar} + \psi_A(x)\,e^{-iE_At/\hbar}\right)\\ &= \frac{e^{-iE_St/\hbar}}{\sqrt{2}}\left(\psi_S(x) + \psi_A(x)e^{-i\omega t}\right)\ ,\end{aligned}$$

avec $\nu = (E_A - E_S)/h = 2A \propto e^{-K\Delta}$, la fréquence de Bohr du système.

Cette valeur vaut $\nu = 24$ GHz pour l'ammoniac. Très sensible à b et V_0

PREMIER POSTULAT

Principe de superposition :

A chaque système physique est associé un espace de Hilbert $\mathcal{E}_H$ L'état du système est défini à chaque instant par un vecteur normé de $\mathcal{E}_H$:

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

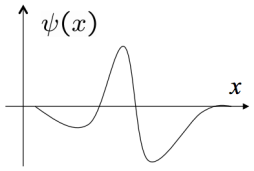
Espace de Hilbert : Espace vectoriel de dimension finie ou infinie, muni d'une norme et d'un produit scalaire défini positif, complet et séparable (contient un ensemble dénombrable dense)

Exemple : espace des fonctions de carré sommable $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3)$

Description non unique : plusieurs bases dans une espace vectoriel, par exemple la représentation x et p que l'on a vu en mécanique ondulatoire

Ces deux représentations sont le même vecteur de $\mathcal{E}_H$

UN EXEMPLE AVEC LA MÉCANIQUE ONDULATOIRE



Comment caracteriser une fonction d'onde ?

1. A l'aide de ses valeurs en tout point de l'espace position
$$\psi(x)$$
infinité non dénombrable
2. A l'aide de sa transformée de Fourier (ses valeurs en tout point de l'espace impulsion)
$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx$$
infinité non dénombrable
3. A l'aide de sa décomposition sur une base Hilbertienne ϕ_n :
$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \, \phi_n(x)$$
C'est à dire les coefficients $C_0, C_1, ...C_n$ *infinité dénombrable*

PRODUIT SCALAIRE HERMITIEN

- Définition d'un produit scalaire de $|\psi_1\rangle$ par $|\psi_2\rangle$ dans $\mathcal{E}_H$:
  - Hermitien : $(\langle\psi_2|\psi_1\rangle)^* = \langle\psi_1|\psi_2\rangle$
  - Linéaire en $|\psi_1\rangle$
  - Anti-linéaire en $|\psi_2\rangle$
  - En dimension finie : $|u\rangle = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}$ $|v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$ $\langle v|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} v_i^* u_i$
  - En dimension infinie :
$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \int \psi_2^*(\boldsymbol{r})\, \psi_1(\boldsymbol{r})\, d^3r \, .$$

CONSEQUENCES DU PREMIER POSTULAT

- Définition de la norme : $||\psi|| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$
- Normalisation : $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$
- Décomposition : Dans les espaces séparables (espaces de Hilbert) il existe une base Hilbertienne. On peut décomposer les vecteurs de l'espace sur cette base $|\phi_n\rangle$:
$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\phi_n\rangle \qquad \sum_n |C_n|^2 = 1$$

Les C_n se calculent en faisant le produit scalaire : $C_n = \langle\phi_n|\psi\rangle$

- Relation de fermeture : $|\psi\rangle = \sum_n C_n|\phi_n\rangle = \sum_n \langle\phi_n|\psi\rangle|\phi_n\rangle$
$$= \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi\rangle$$
$$= |\psi\rangle \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| \qquad \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = I$$

PRINCIPE DE SUPERPOSITION

- C'est un point clé de la Physique Quantique, qui est sous-jacent de la notion d'espace vectoriel.

Si $|\psi_1\rangle$ est dans ε_H et $|\psi_2\rangle$ est dans ε_H alors toutes combinaisons linéaires est également dans ε_H

Pour conservez la normalisation on a par exemple :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\psi_1\rangle + \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}}|\psi_2\rangle$$

- Le facteur de phase global ne joue aucun role, par contre le facteur de phase entre les deux vecteurs $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ est très important !
- Autres exemples :
  - les états symétriques et anti-symétriques de la molécule d'ammoniac (espace de dimension 2)
  - Les fonctions de Hermite (espace de dimension infinie)

NOTATIONS DE DIRAC : BRAS ET KETS

- <u>Définitions des kets.</u>

Depuis le début de ce cours nous utilisons la notation de Dirac.
On a vu qu'un ket est un élement de ε_H

- <u>Définitions des bras.</u>

On introduit l'espace dual de ε_H noté ε_H^*, l'espace vectoriel des applications linéaires de ε_H.

Les élements de ε_H^* sont notés $\langle\psi|$ et sont appelés : bras.

Le produit scalaire de 2 kets peut s'interpreter comme l'application d'un bra sur un ket. C'est alors un produit matriciel d'un vecteur ligne (le bra) sur un vecteur colonne (le ket) : <u>bra X ket = nombre complexe</u>

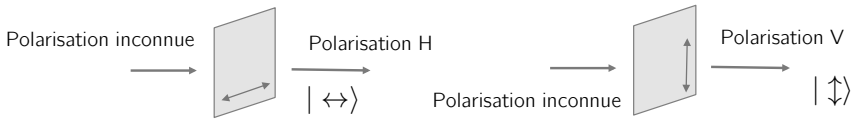
Le bra associé à un ket $|\psi_b\rangle = \begin{pmatrix} D_0 \\ D_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$ est $\langle\psi_b| = (D_0^*\,,\ D_1^*\,,\ \ldots)$

EXEMPLE : LA POLARISATION D'UN PHOTON

Comme pour le champ électromagnétique, on peut définir la polarisation des photons lorsqu'ils sont émis un par un.

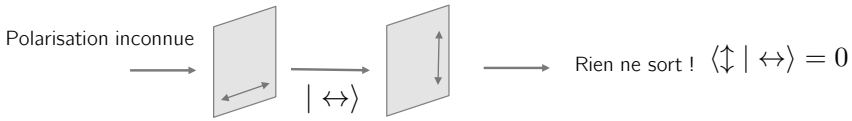
C'est un degré de liberté supplémentaire (longueur d'onde, direction...)

- Pour un photon se propageant dans le vide vers la droite (z >0), on définit une base pour la polarisation du photon :



- Orthonormé : $\langle\leftrightarrow|\updownarrow\rangle = 0 \quad \langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = 1$

$\langle\updownarrow|\updownarrow\rangle = 1$

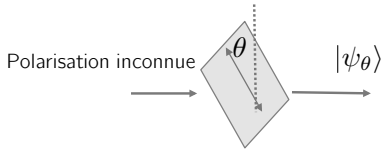


EXEMPLE : LA POLARISATION D'UN PHOTON

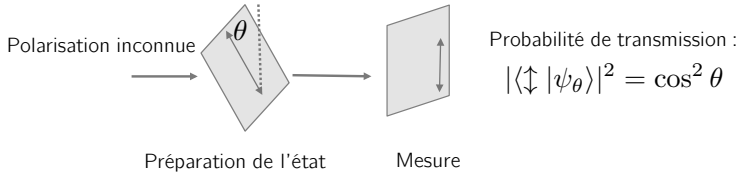
On travaille dans un espace vectoriel de dimension 2. Il est possible de construire une superposition des deux états :

$$|\psi_\theta\rangle = \cos\theta|\updownarrow\rangle + \sin\theta|\leftrightarrow\rangle$$

C'est la situation suivante :



Loi de Malus :



QUIZZ - POLARISATION CIRCULAIRE :

DEUXIEME POSTULAT

- A toute grandeur physique A est associé un opérateur linéaire auto-adjoint (ou hermitien) $\hat{A}$ de ε_H. On dit que $\hat{A}$ est *l'observable* correspondant à la grandeur physique A.
- Soit $|\psi\rangle$ l'état d'un système au moment où l'on effectue une mesure de la grandeur A. Quelque soit $|\psi\rangle$, les seuls résultats possibles de cette mesure sont les valeurs propres a_α de l'observable $\hat{A}$.
- Pour des valeurs propres non-dégénérées, la probabilité de trouver le resultat a_α lors d'une mesure de A est donnée par : $\mathbf{P}(a_\alpha) = |C_\alpha|^2$ avec $|\psi\rangle = \sum_\alpha C_\alpha |\psi_\alpha\rangle$

  On peut étendre ce résultat à toutes les valeurs propres : projecteurs
- Immédiatement après la mesure de A ayant donnée la valeur a_α le nouvel état du système $|\psi'\rangle$ est :

$$|\psi'\rangle = |\psi_\alpha\rangle / ||\psi_\alpha||$$

OPERATEURS DANS L'ESPACE DE HILBERT

Un opérateur linéaire $\hat{A}$ est une application linéaire de ε_H dans lui même qui transforme un ket $|\psi\rangle$ en un autre ket $\hat{A}|\psi\rangle$.

- Produit scalaire avec un autre ket $|\phi\rangle$: $\langle\phi|(\hat{A}|\psi\rangle) = (\langle\phi|\hat{A})|\psi\rangle$ du fait de l'associativité du produit matriciel.
  On note donc : $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$
- On peut caractériser totalement un opérateur hilbertien par sa matrice dans une base hilbertienne.
  En dimension finie l'élement de matrice de $\hat{A}$ entre $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$est $\langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$
- Théorème spectral : Un opérateur hermitien est diagonalisable et on peut former une base hilbertienne avec ses vecteurs propres
- La valeur moyenne d'un opérateur $\hat{A}$ pour l'état $|\psi\rangle$ est donné par :

$$\langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

OPÉRATEURS HERMITIENS

Représentation matricielle d'un opérateur auto-adjoint :

En dimension finie, un opérateur est hermitien si et seulement si sa matrice $[A_{ij}]$ vérifie $A_{ij} = A^*_{ji}$

Les matrices sont donc réelles sur la diagonale et de symétrie hermitienne pour les termes non-diagonaux.

Les operateurs x et p sont ils auto-adjoints ?

$$\begin{aligned}
\langle\psi_2|\hat{x}^\dagger|\psi_1\rangle &= (\langle\psi_1|\hat{x}|\psi_2\rangle)^* = \left(\int \psi_1^*(x)\, x\, \psi_2(x)\, dx\right)^* \\
&= \int \psi_2^*(x)\, x\, \psi_1(x)\, dx = \langle\psi_2|\hat{x}|\psi_1\rangle
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle\psi_2|\hat{p}_x^\dagger|\psi_1\rangle &= (\langle\psi_1|\hat{p}_x|\psi_2\rangle)^* = \left(\int \psi_1^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\, d^3r\right)^* \\
&= -\frac{\hbar}{i}\int \frac{\partial\psi_2^*}{\partial x}\, \psi_1\, d^3r \quad .
\end{aligned}$$

$$\langle\psi_2|\hat{p}_x^\dagger|\psi_1\rangle = \frac{\hbar}{i}\int \psi_2^* \frac{\partial\psi_1}{\partial x}\, d^3r = \langle\psi_2|\hat{p}_x|\psi_1\rangle \; .$$

QUIZZ : REGLES DE CALCUL

MESURE ET PROJECTEURS

- Multiplication d'un ket par un bra :

$$(|u\rangle\langle v|)|\psi\rangle = |u\rangle\langle v|\psi\rangle = \lambda|u\rangle$$

avec $\lambda = \langle v|\psi\rangle$.

- Définition d'un projecteur sur l'état $|n\rangle$: $\hat{P}_n = |n\rangle\langle n|$

On a : $\hat{P}_n|\psi\rangle = (|n\rangle\langle n|)|\psi\rangle = \langle n|\psi\rangle|n\rangle = C_n|n\rangle$ et $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$

- Relation de fermeture : $\sum_{\text{tous les } n} \hat{P}_n = \sum_{\text{tous les } n} |n\rangle\langle n| = \hat{I}$

- Pour des valeurs propres quelconques, la probabilité de trouver le resultat a_α lors d'une mesure de A est donnée par :

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = \|\psi_\alpha\|^2 \qquad \text{où} \quad |\psi_\alpha\rangle = \hat{P}_\alpha|\psi\rangle$$

HAMILTONIEN : OPÉRATEUR ÉNERGIE

- Les vecteurs propres $|\psi_\alpha\rangle$ du Hamiltonien sont des états stationnaires

$$\hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$$

Si on mesure l'énergie du système, l'observable est le Hamiltonien.
Juste après la mesure l'état du système est $|\psi_\alpha\rangle$ correspondant à la valeur propre E_α.

Son évolution temporelle est donc $|\psi(t)\rangle = |\psi_\alpha\rangle e^{-iE_\alpha t/\hbar}$

Une mesure ultérieure de l'énergie donnera donc à nouveau E_α.

- Si maintenant on mesure l'observable $\hat{A}$ quelconque, ses vecteurs propres n'ont aucune raison d'être des états stationnaires.

Lors de la mesure, on projette sur un état propre de $\hat{A}$: $|\psi_\beta\rangle$

$|\psi_\beta\rangle$ peut se décomposer dans la base $|\psi_\alpha\rangle$. Immédiatement après la mesure on est dans l'état $|\psi_\beta\rangle$, mais il s'ensuit une évolution temporelle qui ne conserve pas l'état propre de $\hat{A}$!!

TROISIEME POSTULAT

- Evolution temporelle :

Soit $|\psi(t)\rangle$ l'état d'un système à l'instant t. Tant que le système n'est soumis à aucune observation, son évolution au cours du temps est régie par l'équation de Schrödinger :

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

Si H ne dépend pas explicitement du temps, les états propres de l'énergie sont les vecteur propres de H : $\hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$

On peut décomposer un vecteur d'état quelconque sur la base formée de ces états propres :

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_\alpha C_\alpha|\psi_\alpha\rangle \qquad C_\alpha = \langle\psi_\alpha|\psi(t=0)\rangle$$

EVOLUTION TEMPORELLE

A l'instant t, nous aurons :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\alpha \lambda_\alpha(t)|\psi_\alpha\rangle \qquad \text{avec} \qquad \lambda_\alpha(0) = C_\alpha \ .$$

Trouver l'évolution temporelle d'un vecteur d'état revient donc à trouver les coefficients $\lambda_\alpha(t)$

On pose donc l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \sum \frac{d}{dt}\lambda_\alpha(t)|\psi_\alpha\rangle = \sum \lambda_\alpha(t) E_\alpha |\psi_\alpha\rangle$$

On a ensuite (orthogonalité de vecteurs propres) : $i\hbar \frac{d}{dt}\lambda_\alpha(t) = E_\alpha \lambda_\alpha(t)$

On a donc : $|\psi(t)\rangle = \sum C_\alpha e^{-iE_\alpha t/\hbar}|\psi_\alpha\rangle$

Ce n'est rien d'autre qu'une généralisation du cours 2 !

SUPERPOSITION D'ETATS STATIONNAIRES

Soient $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ deux vecteurs propres normalisés d'un Hamiltonien $\hat{H}$ correspondant à des valeurs propres distinctes E_1 et E_2 .

Prenons l'état $|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\right)$

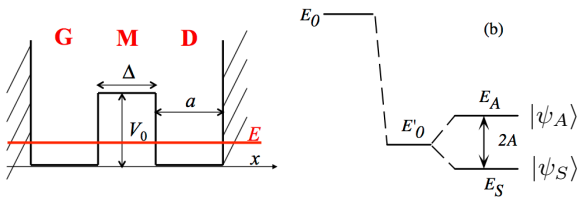
- Calculons la valeur moyenne de l'énergie pour cet état, ainsi que l'écart quadratique moyen ?
- Le système est dans l'état $|\psi_-\rangle$ à t=0, donnez son évolution temporelle ?

Imaginons un observable $\hat{A}$ qui a les propriétés suivantes :

$$\hat{A}|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle \qquad \hat{A}|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle$$

- Donnez une représentation matricielle de $\hat{A}$. Donnez ses valeurs propres ? Donnez ses vecteurs propres comme combinaison linéaire de $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$?
- Si le système est dans l'état $|\psi_-\rangle$ à t=0, quel est la probabilité de trouver la valeur -1 lors d'une mesure de $\hat{A}$ au temps t ?

RAPPEL ET POSITION DU PROBLEME



On ne s'intéresse qu'aux deux niveaux d'énergie les plus bas, ce sont des états propres de H, donc stationnaires $|\psi_A\rangle$ et $|\psi_S\rangle$.

Un état quelconque s'écrira dans cette base : $|\psi\rangle = \lambda|\psi_S\rangle + \mu|\psi_A\rangle$

ou sous forme matricielle $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix}$ avec $|\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1$

Que vaut le Hamiltonien dans cette base ? $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$

C'est la restriction du Hamiltonien au sous-espace qui nous intéresse !

EVOLUTION TEMPORELLE

Comme d'habitude : $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \qquad \hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 - A & 0 \\ 0 & E_0 + A \end{pmatrix}$

Puis $|\psi(t)\rangle = \exp(-iE_0 t/\hbar)\begin{pmatrix} \lambda \ \exp(i\omega_0 t/2) \\ \mu \ \exp(-i\omega_0 t/2) \end{pmatrix}$ avec $2A = \hbar\omega_0$

Nous avions définis $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$, les états correspondant aux configurations classiques d'une particule à droite ou à gauche.

$$|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle\right) \qquad |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_S\rangle - |\psi_A\rangle\right)$$

Soit sous forme matricielle : $|\psi_D\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |\psi_G\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Ce sont les vecteurs propres de :

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{X}|\psi_D\rangle = |\psi_D\rangle \quad ; \quad \hat{X}|\psi_G\rangle = -|\psi_G\rangle$$

OBSERVABLE POSITION

L'observable X est donc l'observable « position » :

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{X}|\psi_D\rangle = |\psi_D\rangle \quad ; \quad \hat{X}|\psi_G\rangle = -|\psi_G\rangle$$

On obtient la valeur +1 si la particule est à droite et -1 à gauche.
Ce n'est pas l'observable position au sens des fonctions d'onde !

On peut calculer la valeur moyenne de la position dans l'état

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-iE_0 t/\hbar) \begin{pmatrix} \lambda \ \exp(i\omega_0 t/2) \\ \mu \ \exp(-i\omega_0 t/2) \end{pmatrix}$$

On trouve : $\langle x \rangle = \lambda^* \mu \ e^{-i\omega_0 t} + \lambda \mu^* \ e^{i\omega_0 t}$

Si l'état initial est $|\psi_D\rangle$ cela se simplifie en : $\langle x \rangle = \cos \omega_0 t$

On a donc bien une oscillation comme nous avions vu précédemment.

COUPLAGE ET TRANSITION

On peut inverser le problème et se demander comment s'écrit le Hamiltonien, l'observable position et les états symétriques et anti-symétriques dans la base $|\psi_D\rangle$ et $|\psi_G\rangle$?

On a : $|\psi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad |\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Dans cette base X est diagonal : $\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Et H s'écrit : $\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$

Les termes diagonaux sont les énergies des états en absence de couplage (barrière haute et large).

Les termes anti-diagonaux sont des termes de couplage ! Ils caractérisent la transition entre les deux états à la fréquence $A/\hbar$

CONGRES DE SOLVAY 1927

SOLVAY CONFERENCE 1927

A. PICARD E. HENRIOT P. EHRENFEST Ed. HERSEN Th. DE DONDER E. SCHRÖDINGER E. VERSCHAFFELT W. PAULI W. HEISENBERG R.H FOWLER L. BRILLOUIN
P. DEBYE M. KNUDSEN W.L. BRAGG H.A. KRAMERS P.A.M. DIRAC A.H. COMPTON L. de BROGLIE M. BORN N. BOHR
I. LANGMUIR M. PLANCK Mme CURIE H.A. LORENTZ A. EINSTEIN P. LANGEVIN Ch.E. GUYE C.T.R. WILSON O.W. RICHARDSON
Absents : Sir W.H. BRAGG, H. DESLANDRES et E. VAN AUBEL

QUIZZ – PRIX NOBEL 2015