

# INTRODUCTION À LA MÉCANIQUE QUANTIQUE

Notes de cours de L3 - Ecole Normale Supérieure de Cachan

Jérémy Neveu

Étudiant au département de physique de l'ENS de Cachan

3 avril 2008



# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>1 Le monde quantique</b>	<b>9</b>
<b>2 Particule matérielle à une dimension, fonction d'onde</b>	<b>11</b>
2.1 Introduction . . . . .	11
2.1.1 Le monde classique . . . . .	11
2.1.2 Le monde quantique . . . . .	12
2.2 Fonction d'onde . . . . .	12
2.2.1 Origine de l'équation de Schrödinger . . . . .	12
2.2.2 Principe . . . . .	13
2.2.3 Conséquences . . . . .	13
2.2.4 Etats d'énergie/fréquence définie . . . . .	14
2.3 Quantité de mouvement . . . . .	14
2.3.1 Etats de p/k défini . . . . .	14
2.3.2 Paquet d'onde . . . . .	15
2.3.3 Formulaire . . . . .	15
2.3.4 "Représentation p" . . . . .	15
2.3.5 Courant de probabilité . . . . .	15
2.4 Moyennes statistiques . . . . .	16
2.4.1 Mesures sur le système . . . . .	16
2.4.2 Moyennes statistiques . . . . .	17
2.4.3 Inégalité de Heisenberg . . . . .	19
2.5 Particule libre $V(x) = 0$ . . . . .	20
2.5.1 Evolution temporelle . . . . .	20
2.5.2 Particule "localisée" . . . . .	20
2.6 Particule avec saut de potentiel . . . . .	21
2.6.1 Solution stationnaire . . . . .	21
2.6.2 Conditions aux limites de $\phi(x)$ . . . . .	21
2.6.3 Marche de potentiel . . . . .	21
2.6.4 Barrière de potentiel . . . . .	23
2.7 Puits de potentiel . . . . .	24

2.7.1	Cas classique . . . . .	24
2.7.2	Conditions aux limites . . . . .	24
2.7.3	Résolution pour le puits infini . . . . .	24
2.7.4	Etat fondamental . . . . .	25
2.7.5	Puits de potentiel fini . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Approche matricielle : systèmes à deux niveaux</b>	<b>27</b>
3.1	Approche matricielle . . . . .	27
3.1.1	Puits infini . . . . .	27
3.1.2	Notations de Dirac . . . . .	28
3.1.3	Valeur moyenne . . . . .	28
3.2	Etats de polarisation de la lumière . . . . .	29
3.2.1	Rappels classiques . . . . .	29
3.2.2	Etats de polarisation du photon . . . . .	29
3.2.3	Polariseur . . . . .	29
3.3	Spin d'une particule, dispositif de Stern-Gerlach . . . . .	30
3.3.1	Mesure d'une composante du moment magnétique . . . . .	30
3.3.2	Etats d'un spin 1/2 . . . . .	32
<b>4</b>	<b>Principes généraux de la mécanique quantique</b>	<b>33</b>
4.1	Etats d'un système physique . . . . .	33
4.1.1	Premier principe . . . . .	33
4.1.2	Bra et ket . . . . .	34
4.2	Grandeurs physiques . . . . .	34
4.2.1	Principe P2 . . . . .	34
4.2.2	Mesure d'une grandeur physique . . . . .	34
4.2.3	Conséquences . . . . .	35
4.2.4	Quelques relations utiles . . . . .	35
4.2.5	Valeur moyenne . . . . .	36
4.2.6	Commutation des observables . . . . .	37
4.2.7	Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC) (chapitre tiré du Cohen-Tannoudji) . . . . .	38
4.2.8	Inégalité de Heisenberg . . . . .	39
4.3	Evolution temporelle . . . . .	40
4.3.1	L'opérateur hamiltonien . . . . .	40
4.3.2	Equation de Schrödinger . . . . .	40
4.3.3	Eléments propres de $\hat{H}$ . . . . .	40
4.3.4	Théorème d'Ehrenfest . . . . .	41
4.4	La mesure dans le monde quantique . . . . .	41
4.4.1	Exemples . . . . .	41
4.4.2	Mesures successives . . . . .	42
4.4.3	Mesure conditionnelle . . . . .	43
4.4.4	Etat conditionnel du système . . . . .	43
4.4.5	Exemple d'effet physique de l'appareil de mesure . . . . .	43

<b>5</b>	<b>Oscillateur harmonique à une dimension</b>	<b>45</b>
5.1	Rappel classique . . . . .	45
5.2	Approche fonction d'onde . . . . .	46
5.3	Approche matricielle . . . . .	47
5.3.1	Hamiltonien . . . . .	47
5.3.2	Opérateurs $\hat{a}$ , $\hat{a}^\dagger$ , $\hat{N}$ . . . . .	47
5.3.3	Éléments propres de $\hat{N}$ . . . . .	47
<b>6</b>	<b>Le moment cinétique</b>	<b>53</b>
6.1	Rappel classique . . . . .	53
6.2	Opérateur moment cinétique . . . . .	53
6.2.1	Définition 1 . . . . .	54
6.2.2	Relations de commutation . . . . .	54
6.2.3	Définition 2 . . . . .	54
6.2.4	Éléments propres de $\hat{J}^2$ et $\hat{J}_z$ . . . . .	54
6.2.5	Valeurs de j et m . . . . .	55
6.3	Moment cinétique intrinsèque : spin . . . . .	55
6.3.1	Expériences . . . . .	55
6.3.2	Spin 1/2 . . . . .	56
6.4	Résonance magnétique . . . . .	57
6.4.1	Dispositif expérimental . . . . .	57
6.4.2	Evolution de $\langle \hat{S} \rangle$ . . . . .	57
6.5	Moment cinétique orbital . . . . .	58
6.5.1	Valeurs propres de $\hat{L}_z$ , $\hat{L}^2$ . . . . .	58
6.5.2	Harmoniques sphériques . . . . .	58
6.6	Moment cinétique et rotations . . . . .	59
<b>7</b>	<b>Résolution approchée de l'équation de Schrödinger</b>	<b>61</b>
7.1	Méthode générale des perturbations stationnaires . . . . .	61
7.2	Niveau non perturbé non dégénéré . . . . .	62
7.2.1	Energie à l'ordre 1 . . . . .	62
7.2.2	Vecteur propre à l'ordre 1 . . . . .	62
7.2.3	Energie à l'ordre 2 . . . . .	63
7.3	Niveau non perturbé dégénéré . . . . .	63
7.4	Méthode des variations . . . . .	64
7.4.1	Propriétés de l'état fondamental . . . . .	64
7.4.2	Principe de la méthode . . . . .	64
7.4.3	Exemple . . . . .	64
<b>8</b>	<b>Systèmes à deux particules</b>	<b>65</b>
8.1	Produit tensoriel d'espaces de Hilbert . . . . .	65
8.1.1	Exemple simple . . . . .	65
8.1.2	Notion générale de produit tensoriel . . . . .	65
8.1.3	Etat factorisé, état intriqué . . . . .	66
8.1.4	Fonction de corrélation $C_{AB}$ . . . . .	67

8.1.5	Théorème de non-clonage . . . . .	68
8.1.6	Autre exemple de produit tensoriel . . . . .	69
8.2	Deux particules de spin $1/2$ . . . . .	69
8.2.1	Position du problème . . . . .	69
8.2.2	Moment cinétique total . . . . .	69
8.2.3	Relation entre les bases . . . . .	70
8.2.4	Etat singulet . . . . .	71
8.3	Vous avez dit corrélations quantiques ? . . . . .	72
8.3.1	Corrélation quantique . . . . .	72
8.3.2	Corrélation classique . . . . .	72
8.3.3	Paradoxe Einstein-Podolsky-Rosen (1935) et inégalités de Bell (1964)	73

# Introduction

Ces notes de cours sont inspirées du cours de L3 "Introduction à la Mécanique Quantique" dispensé par M. Claude Fabre aux élèves de l'ENS de Cachan. Le but de ce cours est de fournir les bases de la mécanique quantique aux élèves ne l'ayant encore jamais abordée auparavant.

On utilisera les notations suivantes :

- $h = 6,62 \times 10^{-34} J \cdot s$  : constante de Planck
- $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,1 \times 10^{-34} J \cdot s$
- $p$  : quantité de mouvement
- $k$  : vecteur d'onde
- $m$  : masse de la particule
- $E$  : énergie de la particule
- $V$  : énergie potentielle d'où dérivent les forces s'exerçant sur la particule
- $\omega$  : pulsation de l'onde
- $t$  : variable de temps
- $x, y, z$  : variables de position
- $\psi$  : fonction d'onde quantique de la particule
- $\tilde{\psi}$  : transformée de Fourier de  $\psi$
- TF : opérateur transformée de Fourier
- $\hat{O}^\dagger$  : opérateur adjoint associé à  $\hat{O}$
- $i$  : nombre complexe  $i^2 = -1$

Attention : ce document n'est constitué que de notes de cours, un certain nombre de schémas et de commentaires pouvant aider à la compréhension des phénomènes quantiques n'ont pas été retranscrits ici.





# Chapitre **1**

## Le monde quantique

Ce chapitre d'introduction correspond à la diffusion d'un Powerpoint disponible en format pdf à l'adresse suivante :

[http ://www.phytem.ens-cachan.fr/telechargement/Module%20L2%20meca%20Q/monde\\_quantique.pdf](http://www.phytem.ens-cachan.fr/telechargement/Module%20L2%20meca%20Q/monde_quantique.pdf)



# Chapitre 2

## Particule matérielle à une dimension, fonction d'onde

### 2.1 Introduction

On s'intéresse à une particule dans un champ d'énergie potentielle à une dimension  $V(x)$ .

#### 2.1.1 Le monde classique

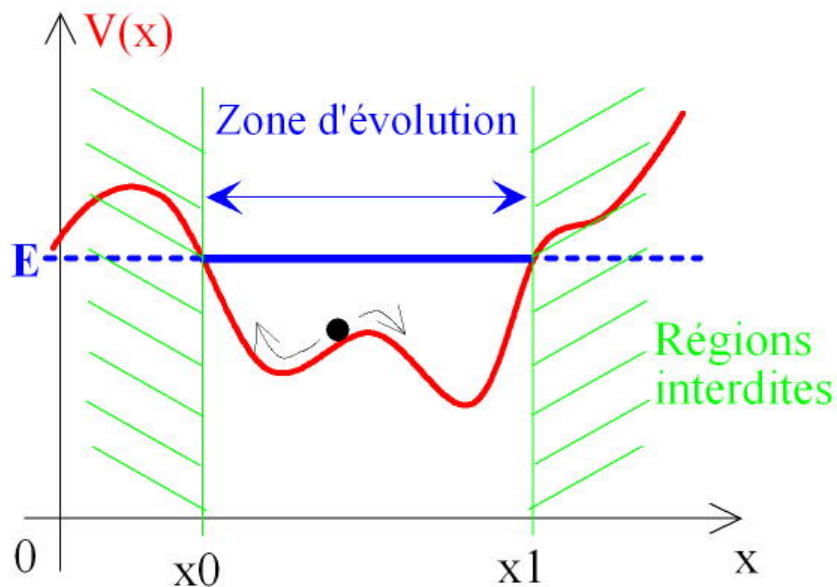


FIG. 2.1 – Zone accessible à une particule d'énergie  $E$  en mécanique classique dans un potentiel  $V(x)$

Pour une particule classique, l'énergie mécanique est une constante du mouvement

dans un champ de forces conservatif :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \text{constante}$$

Les régions telles que  $V(x) > E$  ne sont alors pas accessibles à une particule classique.

### 2.1.2 Le monde quantique

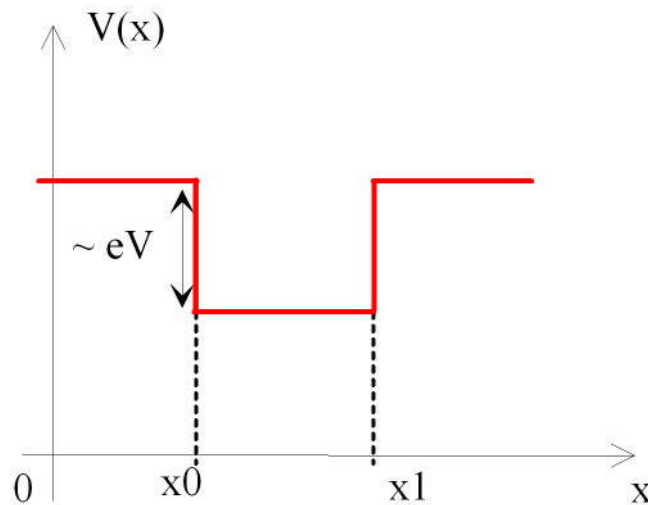


FIG. 2.2 – Potentiel quantique

Pour une particule quantique, dans un champ de potentiel nanoscopique, il en est différemment : il n'y a plus de régions interdites comme nous le verrons plus tard.

## 2.2 Fonction d'onde

À une particule, on associe une onde :

$$E = \hbar\omega \text{ et } \vec{p} = \hbar\vec{k}$$

### 2.2.1 Origine de l'équation de Schrödinger

Connaissant la correspondance onde/particule par les formules de De Broglie, comment décrire le mouvement d'une particule avec le formalisme des ondes ? Pour la lumière, Fresnel avait eu l'idée de travailler (avec succès) avec  $u(\vec{r}, t)$  une quantité ondulatoire qui s'avérait être  $\vec{E}$ . De même, Erwin Schrödinger tenta d'établir une équation régissant le comportement d'une "onde quantique" avec une fonction d'onde  $\psi(\vec{r}, t)$ . Pour une onde

plane :

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \psi_0 e^{i(kx - \omega t)} \\ \frac{\partial \psi}{\partial x} &= ik\psi = i\frac{p}{\hbar}\psi \\ \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -ik\omega = -i\frac{E}{\hbar}\psi\end{aligned}$$

D'où :

$$\begin{aligned}\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= p\psi \\ i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= E\psi\end{aligned}$$

Or pour une particule :

$$\begin{aligned}E &= \frac{p^2}{2m} + V(x) \Leftrightarrow E\psi = \frac{p^2}{2m}\psi + V(x)\psi \\ &\Leftrightarrow i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi\end{aligned}$$

### 2.2.2 Principe

Le mouvement d'une particule dans un espace à une dimension est décrit par une fonction complexe continue  $\psi(x, t)$  qui obéit à l'équation de Schrödinger :

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

Fresnel a remarqué que  $u^2$  correspondait à l'intensité lumineuse. Par analogie, Born a donné la bonne interprétation de  $\psi$  : la probabilité de trouver la particule entre  $x$  et  $x+dx$  est :

$$dP = |\psi(x, t)|^2 dx$$

$\psi(x, t)$  est appelé amplitude de probabilité.

### 2.2.3 Conséquences

La seule chose dont on est sûr est que la particule existe et est quelque-part :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dP = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

$\psi$  est donc une fonction de carré sommable. Ceci est une différence avec l'optique : aucune contrainte n'est imposé sur  $u^2$ . Ainsi,  $|\psi(x, t)|^2$  est borné par la normalisation mais pas  $|u(x, t)|^2$ .

L'équation de Schrödinger est linéaire : si  $\psi_1$  (exemple : chat vivant) et  $\psi_2$  (exemple : chat mort) sont deux états solutions de l'équation de Schrödinger, alors toute combinaison linéaire  $a\psi_1 + b\psi_2$  (chat mort et vivant!) est solution. On a donc le principe de superposition pour l'équation de Schrödinger, même si on parle de particules !

De plus,  $\psi(x, t)$  et  $\psi(x, t)e^{i\phi}$  décrivent la même situation physique car ces deux fonctions d'onde donnent la même probabilité de présence pour la particule.

Pour la lumière,  $\frac{\partial^2 u^2}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u^2}{\partial t^2} = 0$  admet des solutions  $u(x, t)$  réelles. En revanche,  $\psi(x, t)$  est toujours complexe car l'équation de Schrödinger est à coefficients complexes.

### 2.2.4 Etats d'énergie/fréquence définie

On cherche une solution de la forme :

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\omega t} = \phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

D'après l'équation de Schrödinger :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi \\ \Leftrightarrow E\phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi^2}{\partial x^2} e^{-i\frac{E}{\hbar}t} + V(x)\phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \\ \Leftrightarrow \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \cdot \right] \phi(x) &= E\phi(x) \end{aligned}$$

On pose  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$ . l'opérateur différentiel hamiltonien. Alors  $\phi$  vérifie :

$$\hat{H}\phi = E\phi$$

$E$  est donc une valeur propre associée au vecteur propre  $\phi$  pour l'opérateur  $\hat{H}$  dans l'espace vectoriel des fonctions.  $\phi$  est alors un état stationnaire du système :

$$dP = |\phi(x)|^2 = dP(x)$$

## 2.3 Quantité de mouvement

### 2.3.1 Etats de p/k défini

On cherche une solution de la forme :

$$\psi(x, t) = \chi(t)e^{ikx} = \chi(t)e^{\frac{p}{\hbar}x}$$

Alors  $|\psi(x, t)|^2 = |\chi(t)|^2$  ne dépend plus que du temps et  $\int_{-\infty}^{+\infty} dP = \int_{-\infty}^{+\infty} \chi(t)dx$  diverge... On ne peut donc pas définir de tels états...

### 2.3.2 Paquet d'onde

Soit un paquet d'onde :

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

$\psi(x, t)$  est donc la transformée de Fourier de  $\tilde{\psi}(p, t)$  :

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

Pour des fonctions  $\psi(x, t)$  vérifiant de bonnes propriétés mathématiques, on peut donc trouver des propriétés sur la quantité de mouvement de la particule grâce à la fonction  $\tilde{\psi}(p, t)$ .

### 2.3.3 Formulaire

Formule de Parseval-Plancherel :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_1(p, t)^* \tilde{\psi}_2(p, t) dp = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x, t)^* \psi_2(x, t) dx$$

En particulier :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\tilde{\psi}(p, t)|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

On a donc une condition de normalisation sur  $\tilde{\psi}(p, t)$  aussi.

### 2.3.4 "Représentation p"

$\tilde{\psi}(p, t)$  est l'amplitude de probabilité de mesurer la quantité de mouvement de la particule entre  $p$  et  $p+dp$ .

### 2.3.5 Courant de probabilité

Le courant de probabilité renseigne sur l'évolution de  $\psi$  par analogie avec les fluides :

$$\text{div} \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Avec l'équation de Schrödinger,  $\rho$  étant l'analogie de  $|\psi|^2$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial j}{\partial x} &= -\frac{\partial \rho}{\partial t} \\ &= -\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left[ -\psi \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi^* + \psi^* \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi \right] \\ &= \frac{\hbar}{2im} \left( \psi \frac{\partial^2 \psi^{*2}}{\partial x^2} - \psi^* \frac{\partial^2 \psi^2}{\partial x^2} \right) \end{aligned}$$

D'où

$$j = \frac{\hbar}{2im} \left( \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

Pour une OPPH  $\psi(x, t) = \psi_0 e^{i(kx - \omega t)}$ , on trouve  $j = \frac{\hbar k}{m} |\psi_0|^2 = \rho \frac{\hbar k}{m} = \rho \frac{p}{m} = \rho v$  comme en mécanique classique.

## 2.4 Moyennes statistiques

### 2.4.1 Mesures sur le système

Si la mesure est individuelle, on ne sait "rien" sauf si  $\psi = 0$  ou si  $|\psi| = 1$ . Il faut faire une suite de mesures :

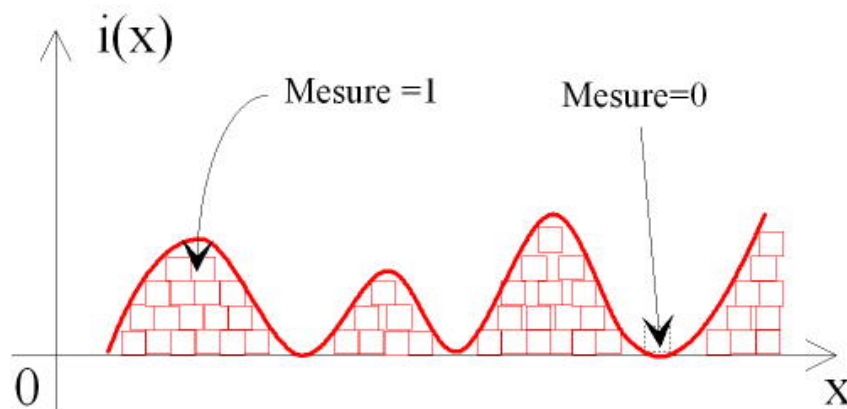


FIG. 2.3 – C'est la répétition de mesures 0/1 qui donne accès à  $|\psi(x)|^2$

Si on répère  $N$  fois la mesure, avec  $N \rightarrow +\infty$ , aux fluctuations près :

$$i(x) = N |\psi(x)|^2$$



## 2.4.2 Moyennes statistiques

### Position

A t donné, la valeur moyenne de la position est :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx$$

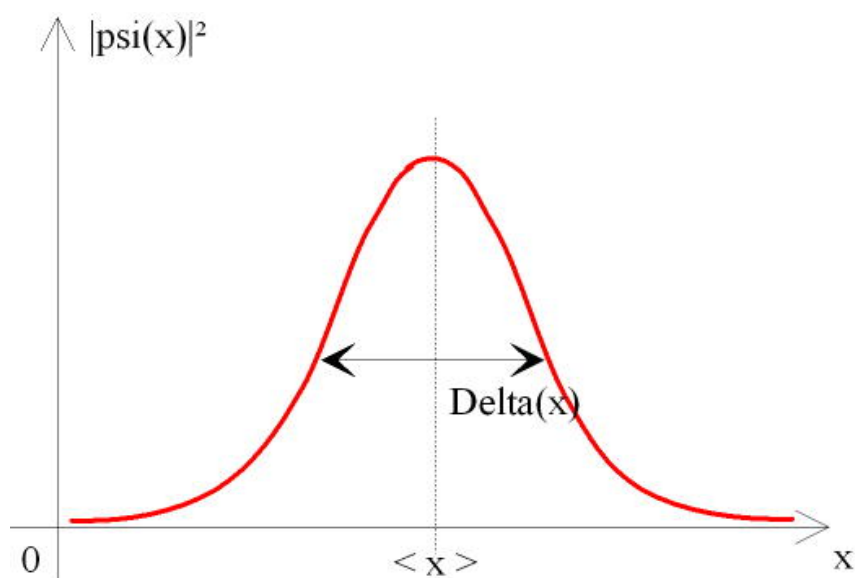


FIG. 2.4 – Densité de probabilité gaussienne

A t donné, l'écart type est :

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 - \langle x \rangle^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$$

### Quantité de mouvement

A t donné, la valeur moyenne de p est :

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{+\infty} p \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p) dp$$

A t donné, l'écart type est :

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 - \langle p \rangle^2 \rangle} = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$$

Or

$$\begin{aligned}
 TF(p\tilde{\psi}(p)) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} p\tilde{\psi}(p, t) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dp \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p, t) e^{-i\frac{p}{\hbar}x} dp \right) \\
 &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x}
 \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(p) p \tilde{\psi}(p) dp \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \hat{P}_x \psi(x) dx
 \end{aligned}$$

avec  $\hat{P}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$  l'opérateur "quantité de mouvement selon x".

De même

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \hat{X} \psi(x) dx$$

avec  $\hat{X} = x$  l'opérateur "position selon x".

### Généralisation

Pour f quelconque :

$$\begin{aligned}
 \langle f(x) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* f(x) \psi(x) dx \\
 \langle g(p) \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) dx \quad \text{avec } f\left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\right) = \sum a_n \left(\frac{\hbar}{i}\right)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}
 \end{aligned}$$

### 2.4.3 Inégalité de Heisenberg

Démonstration :

$$\begin{aligned}
 I(\lambda) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left| x\psi(x) + \lambda\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x} \right|^2 dx \quad \lambda \in \mathbb{R} \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |x\psi(x)|^2 dx + \lambda\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)^* \hbar \frac{\partial\psi(x)}{\partial x} dx + \lambda\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \psi(x)^* \hbar \frac{\partial\psi(x)}{\partial x} \right)^* dx \\
 &\quad + \lambda^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial\psi^*}{\partial x} \frac{\partial\psi}{\partial x} dx \\
 &= \langle x^2 \rangle - \lambda\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx - \lambda^2 \hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} dx \\
 &= \langle x^2 \rangle - \lambda\hbar + \lambda^2 \langle p^2 \rangle \geq 0
 \end{aligned}$$

Or  $\forall \lambda \in \mathbb{R}, I(\lambda) \geq 0$

Donc le polynôme  $I(\lambda)$  n'a pas de racines

$$\Delta = \hbar^2 - 4 \langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \leq 0 \Leftrightarrow \langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

De même avec  $x' = x - \langle x \rangle$  et  $\hat{P}' = \hat{P} - \langle p \rangle$ . On obtient alors l'inégalité d'Heisenberg :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Cette relation est valable pour toutes les fonctions d'ondes  $\psi(x, t)$ .

Si  $|\psi(x)|^2$  est gaussien, alors on a égalité

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Si  $|\psi(x)|^2$  a un unique maximum (ou 2 ou 3), alors on a

$$\Delta x \Delta p = \text{quelques } \frac{\hbar}{2}$$

Si  $|\psi(x)|^2$  est "compliquée", alors

$$\frac{2\Delta x \Delta p}{\hbar} \text{ "grand"}$$

Si on a  $\psi(x)$  tel que  $\Delta x$  est petit, alors  $\Delta p$  est grand. De même si  $\Delta p$  petit pour  $\tilde{\psi}(p)$ , alors  $\Delta x$  est grand. Cette relation est valable pour les ondes en générale car issue des propriétés de la transformée de Fourier.

Il n'y a donc aucun état quantique pour lequel  $\Delta x = 0$  et  $\Delta p = 0$ , donc pas de trajectoire au sens classique du terme. Une particule localisée au repos n'existe pas ! Les variables  $x$  et  $p$  sont appelées variables conjuguées.

L'inégalité de Heisenberg n'est cependant pas liée à la perturbation du système par la mesure de  $x$  et de  $p$  !

## 2.5 Particule libre $V(x) = 0$

### 2.5.1 Evolution temporelle

D'après l'équation de Schrödinger, comme  $V(x) = 0$ ,

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

On cherche une solution de la forme  $\psi(x, t) = \chi_p(t) e^{i\frac{px}{\hbar}}$ . Alors :

$$i\hbar \frac{\partial \chi_p}{\partial t} = -\frac{p^2}{2m} \chi_p(t) \quad \Rightarrow \quad \chi_p(t) = \chi_p(0) e^{-i\frac{p^2 t}{2m\hbar}}$$

$\chi_p$  est de la forme  $e^{-i\omega t}$  d'où la relation de dispersion :

$$\hbar\omega = \frac{p^2}{2m} \quad \Leftrightarrow \quad \omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

On en déduit la vitesse de phase et la vitesse de groupe :

$$v_\phi = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

$$v_g = \frac{\hbar k}{m} = v$$

### 2.5.2 Particule "localisée"

La particule part d'une position "connue" :

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \psi_0 e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\Delta p^2}} e^{i\frac{p_0 x}{\hbar}}$$

On a alors :

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta x(t)} e^{-\frac{(x-\frac{p_0 t}{m})^2}{2\Delta^2 x(t)}}$$

avec en particulier :

$$\langle x \rangle = \frac{p_0 t}{m}$$

$$\Delta^2 x(t) = \frac{\hbar^2}{4\Delta p^2} + \frac{4\Delta p^2}{m^2} t^2$$

$\Delta^2 x(t)$  est croissant avec  $t$ , on a donc étalement du paquet d'onde.

## 2.6 Particule avec saut de potentiel

### 2.6.1 Solution stationnaire

On recherche une solution stationnaire de la forme  $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ . Alors d'après l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

### 2.6.2 Conditions aux limites de $\phi(x)$

$\psi(x, t)$  est continue donc  $\phi(x)$  est continue.

$$\phi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}(V - E)\phi(x)$$

Si  $V-E$  est borné, alors  $\phi'(x)$  est continue.

Si  $V-E$  est infini, alors  $\phi'(x)$  n'est pas continue.

### 2.6.3 Marche de potentiel

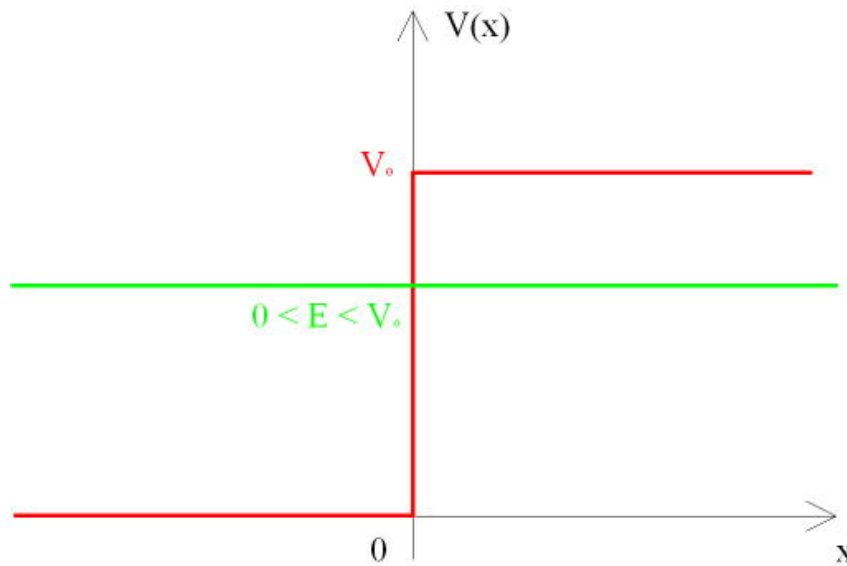


FIG. 2.5 – Marche de potentiel

Pour  $x < 0$ ,  $\phi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\phi(x) = -k^2\phi(x)$  avec  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

D'où  $\phi(x) = \alpha e^{ikx} + \beta e^{-ikx}$

Pour  $x > 0$ ,  $\phi''(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\phi(x) = -K^2\phi(x)$  avec  $K = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$

D'où  $\phi(x) = \gamma e^{Kx} + \delta e^{-Kx}$

Or  $\psi(x)$  est fini en  $+\infty$  donc  $\gamma = 0$ .

Avec les conditions aux limites :

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \delta \text{ car } \phi \text{ continue} \\ ik(\alpha - \beta) = -\delta K \text{ car } \phi' \text{ continue} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \delta \\ -i\frac{k}{K}(\alpha - \beta) = \alpha + \beta \end{cases}$$

$$\begin{cases} \alpha + \beta = \delta \\ \beta(1 - i\frac{k}{K}) = \alpha(-1 - i\frac{k}{K}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \delta = -\frac{2ik}{K-ik}\alpha \\ \beta = -\frac{K+ik}{K-ik}\alpha \end{cases}$$

Donc on obtient une solution stationnaire :

$$\begin{cases} \phi(x) = e^{ikx} - \frac{K+ik}{K-ik}e^{-ikx} & x \leq 0 \\ \phi(x) = -\frac{2ik}{K-ik}e^{-Kx} & x \geq 0 \end{cases}$$

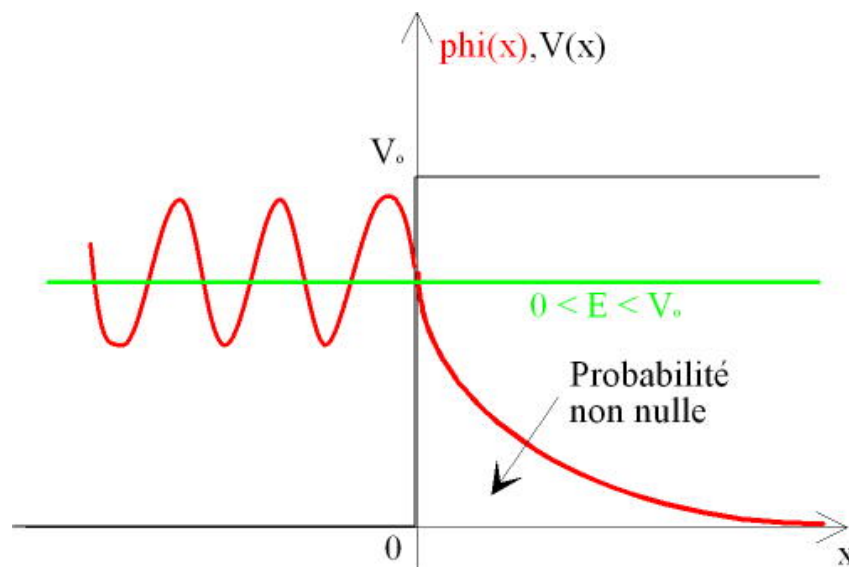


FIG. 2.6 – Solution stationnaire pour la marche de potentiel

On remarque que contrairement à la mécanique classique, la probabilité de présence en  $x > 0$  n'est pas nulle : la particule peut pénétrer dans la zone interdite classiquement.

## 2.6.4 Barrière de potentiel

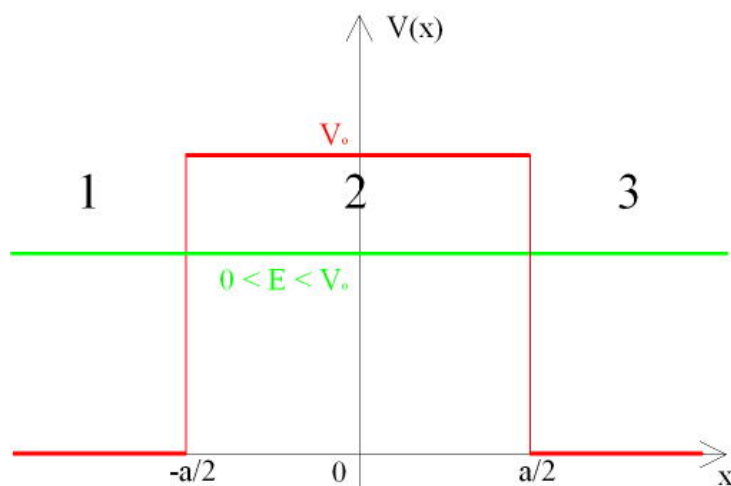


FIG. 2.7 – Barrière de potentiel

Les solutions de la marche de potentiel sont transposables ici, sauf qu'on a 6 inconnues pour 4 équations de continuité... Pour une particule venant de  $-\infty$  :

$$\begin{cases} \phi(x) = e^{ikx} + r e^{-ikx} & x < -\frac{a}{2} \\ \phi(x) = \beta e^{Kx} + \beta' e^{-Kx} & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ \phi(x) = t e^{ikx} & x > \frac{a}{2} \end{cases}$$

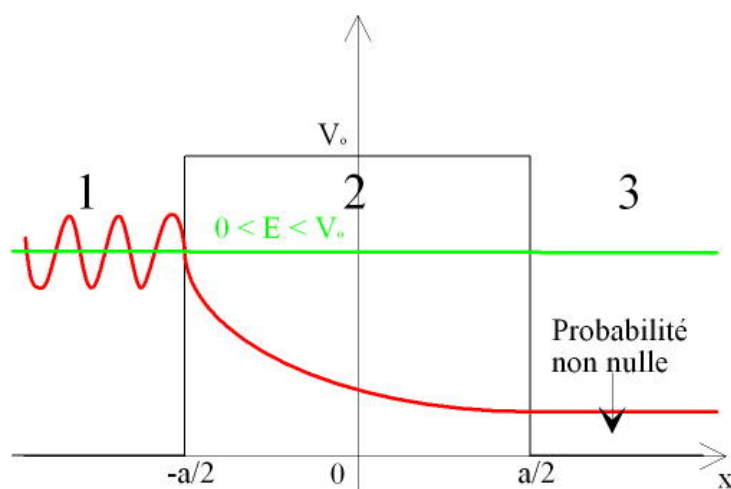


FIG. 2.8 – Solution stationnaire pour la barrière de potentiel

Après calcul, on trouve que la probabilité de transmission est :

$$T = |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2(Ka)}$$

Il y a donc une certaine probabilité non nulle dépendant de l'énergie de la particule et de la taille de la barrière que la particule franchisse cette barrière.

## 2.7 Puits de potentiel

### 2.7.1 Cas classique

Pour une particule classique dans un puits de potentiel, on peut avoir un état lié ou un état de diffusion. Pour une onde, dans le puits on peut avoir une onde stationnaire.

### 2.7.2 Conditions aux limites

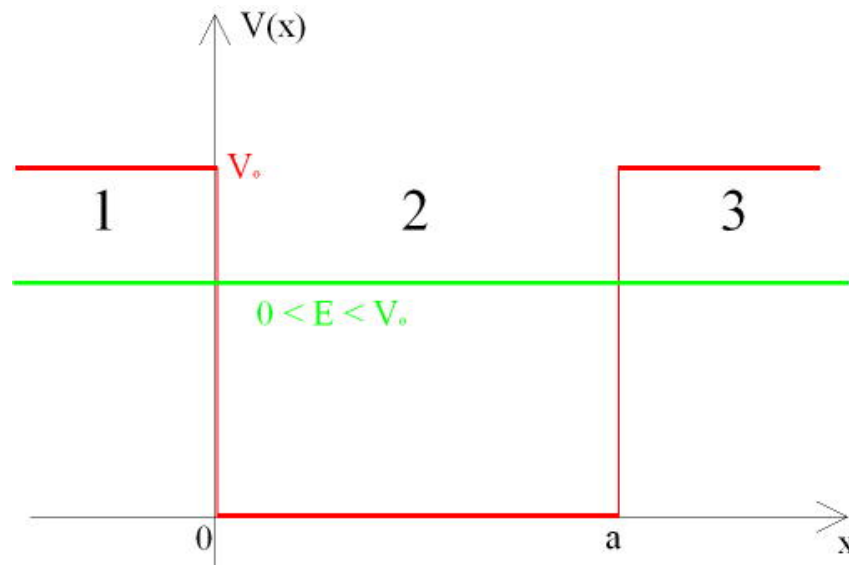


FIG. 2.9 – Puits de potentiel

On cherche une solution stationnaire  $\psi(x, t) = \phi(x)e^{i\frac{E}{\hbar}t}$  avec  $\phi$  et  $\phi'$  continues. Ici on ne s'intéresse qu'au cas où  $V_0 \rightarrow +\infty$  (puits infini). Dans ce cas, on montre que  $\phi(x) = 0$  en dehors du puits, que  $\phi$  reste continue mais pas  $\phi'$ .

### 2.7.3 Résolution pour le puits infini

Pour  $x < 0$  et  $x > a$ ,  $\phi(x) = 0$

Pour  $x \in [0, a]$ ,  $\phi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\phi(x)$



Posons  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ , alors

$$\phi(x) = A \sin kx + B \cos kx \begin{cases} \phi(a) = 0 = A \sin ka + B \cos ka \\ \phi(0) = 0 = B \end{cases}$$

Donc  $ka = n\pi$  avec  $n \in \mathbb{Z}^*$  : l'énergie est quantifiée :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}$$

La particule ne peut occuper que des niveaux d'énergie quantifiés. Il se forme alors une onde stationnaire dans le puits car avec les formules de De Broglie, on obtient :

$$a = n \frac{\lambda}{2}$$

### 2.7.4 Etat fondamental

C'est l'état de plus basse énergie pour  $n=1$  :  $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$ . En mécanique classique, l'état de plus basse énergie pour une particule est  $E=0$ , de même pour une onde stationnaire. En mécanique quantique,  $E=0$  est interdit : il existe une énergie minimale dite énergie de point zéro.

D'après l'inégalité d'Heisenberg, dans le puits infini  $\Delta x \leq a$  donc  $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \geq \frac{\hbar}{2a}$  donc  $p=0$  est interdit. Ainsi, même si  $\langle p \rangle = 0$ ,  $\Delta^2 p = \langle p^2 \rangle \Leftrightarrow \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle \geq \frac{\hbar^2}{8ma^2}$  donc l'énergie cinétique moyenne n'est pas nulle.

### 2.7.5 Puits de potentiel fini

Si  $V_0$  est fini, alors il y a un nombre fini de niveaux d'énergie pour  $E_n < V_0$ . Si  $E > V_0$ , alors  $E$  n'est plus quantifiée (continuum de niveaux).



# Chapitre 3

## Approche matricielle : systèmes à deux niveaux

### 3.1 Approche matricielle

#### 3.1.1 Puits infini

Les états  $\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$  forment la base de la série de Fourier. Ainsi pour toute fonction d'onde  $\psi(x)$  entre 0 et a :

$$\psi(x) = \sum_n c_n \phi_n(x)$$

On définit le produit scalaire par :

$$\langle f|g \rangle \mapsto \int_0^a f^*(x)g(x)dx$$

$$\langle f|f \rangle \mapsto \int_0^a |f(x)|^2 dx$$

$$\langle \phi_n|\phi_{n'} \rangle \mapsto \delta_{n'n} \text{ ainsi } \phi_n \text{ est orthonormée}$$

$$\langle \psi|\phi_{n'} \rangle \mapsto c_{n'}$$

Un état quantique est donc une liste de coefficients complexes :

$$\psi(x) = \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \text{ avec N niveaux}$$

### 3.1.2 Notations de Dirac

$\phi_n(x)$  s'écrit  $|\phi_n\rangle$  ("ket") :

$$|\phi_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \leftarrow \text{n-ième ligne}$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$$

On pose aussi les "bra"  $\langle\psi| = (c_0^* \cdots c_N^*)$  la matrice ligne transconjuguée du ket. Le produit scalaire s'écrit alors :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi'(x)dx = \sum c_n^* c'_n = (c_0^* \cdots c_N^*) \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \langle\psi|\psi'\rangle$$

### 3.1.3 Valeur moyenne

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi^*(x)\psi(x) dx \\ &= \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n^*(x)x\phi_{n'}(x) dx \\ &= \langle\psi| \hat{X} |\psi\rangle \end{aligned}$$

avec  $\hat{X}$  la matrice carrée opérateur de coefficients  $X_{nn'} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n^*(x)x\phi_{n'}(x)dx$ .

On remarque que  $X_{nn'}^* = X_{n'n}$  donc  $\hat{X}$  est un opérateur autoadjoint ou hermitien :

$${}^t \hat{X}^* = \hat{X}$$

## 3.2 Etats de polarisation de la lumière

### 3.2.1 Rappels classiques

Soit une onde électromagnétique plane et harmonique se propageant vers les z croissants :

$$\vec{E} = (\lambda \vec{e}_x + \mu \vec{e}_y) e^{i(kz - \omega t)}$$

Polarisation rectiligne :  $(\lambda, \mu) \in \mathbb{R}^2 : \lambda = E_0 \cos \theta, \mu = E_0 \sin \theta$

Polarisation circulaire gauche :  $\lambda = \frac{E_0}{\sqrt{2}}, \mu = i \frac{E_0}{\sqrt{2}}$

### 3.2.2 Etats de polarisation du photon

A un photon polarisé suivant  $\vec{e}_x$  on associe le vecteur d'état  $|e_x\rangle$ . De même suivant  $\vec{e}_y$  :  $|e_y\rangle$ .  $|e_x\rangle$  et  $|e_y\rangle$  sont des éléments de l'espace vectoriel des états de la lumière. L'état du photon est décrit par :

$$|\psi\rangle = \lambda |e_x\rangle + \mu |e_y\rangle \text{ avec } \begin{cases} (\lambda, \mu) \in \mathbb{C}^2 \\ |\lambda|^2 + |\mu|^2 = 1 \end{cases}$$

$|e_x\rangle$  et  $|e_y\rangle$  forment une base orthonormée (BON). Un photon polarisé à  $\theta = 45^\circ$  est décrit par :

$$|\psi_{45}\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|e_x\rangle + |e_y\rangle)$$

### 3.2.3 Polariseur

Soit un photon polarisé à  $45^\circ$ . Ce photon, qui ne peut pas être coupé en deux, a alors "intuitivement" 50% de chances de traverser le polariseur et 50% de chance d'être réfléchi. Si le polariseur laisse passer les photons polarisés suivant  $\vec{e}_y$  et réfléchit ceux polarisés suivant  $\vec{e}_x$ , cette distribution de probabilité se retrouve par la mécanique quantique :

- la probabilité de transmission est  $|\langle e_y | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}$
- la probabilité de réflexion est  $|\langle e_x | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}$

Après être passé par le polariseur, alors à coup sûr :

- le photon transmis a pour vecteur d'état  $|\psi_{\text{apres}}\rangle = |e_x\rangle$
- le photon réfléchi a pour vecteur d'état  $|\psi_{\text{apres}}\rangle = |e_y\rangle$

La mesure transforme l'incertitude quantique en certitude pour l'état "conditionnel", c'est-à-dire une fois le résultat d'une première mesure connu.

Si on tourne le polariseur de  $45^\circ$ , alors :

- le photon est transmis à coup sûr si  $|\psi\rangle = |\psi_{45}\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|e_x\rangle + |e_y\rangle)$
- le photon est transmis à coup sûr si  $|\psi\rangle = |\psi_{-45}\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|e_x\rangle - |e_y\rangle)$

Si le photon incident a un vecteur d'état  $|\psi\rangle = \lambda |e_x\rangle + \mu |e_y\rangle$ , alors la probabilité de transmission est :

$$|\langle \psi_{45} | \psi \rangle|^2 = \left| \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda + \mu) \right|^2 = \frac{1}{2} |\lambda + \mu|^2$$

Ainsi :

- si  $|\psi\rangle = |e_x\rangle$ , alors  $|\langle\psi_{45}|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}$
- si  $|\psi\rangle = |e_y\rangle$ , alors  $|\langle\psi_{45}|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}$
- si  $|\psi\rangle = |\psi_{45}\rangle$ , alors  $|\langle\psi_{45}|\psi\rangle|^2 = 1$
- si  $|\psi\rangle = |\psi_{-45}\rangle$ , alors  $|\langle\psi_{45}|\psi\rangle|^2 = 0$

### 3.3 Spin d'une particule, dispositif de Stern-Gerlach

#### 3.3.1 Mesure d'une composante du moment magnétique

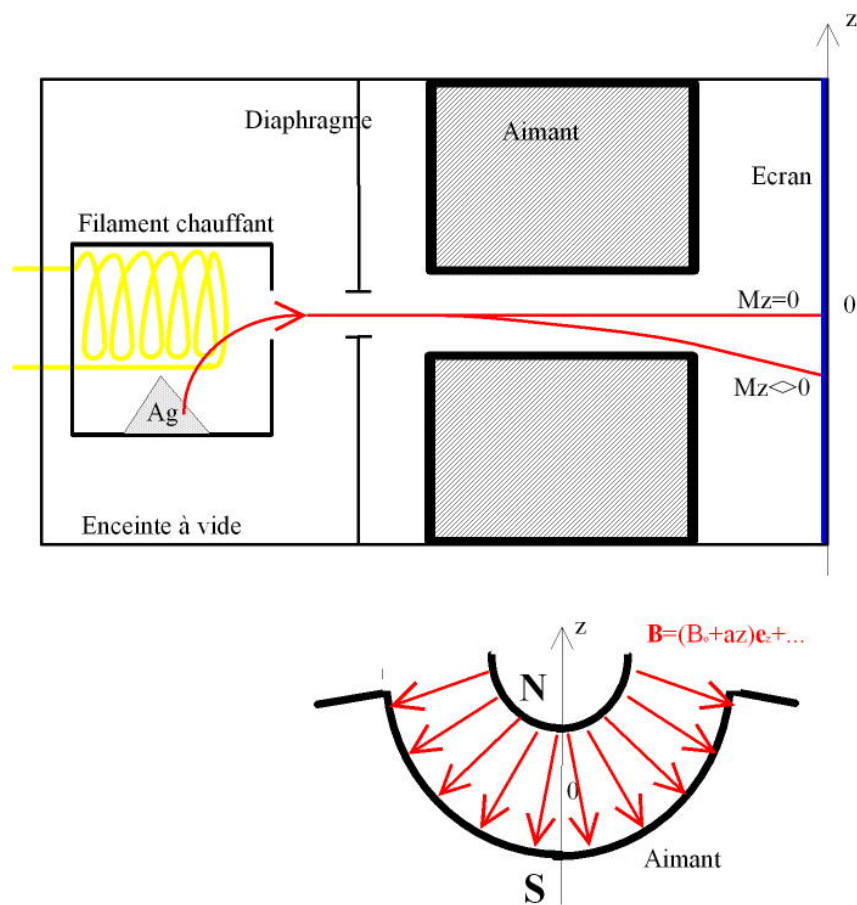


FIG. 3.1 – Dispositif de Stern et Gerlach

Dans une enceinte à vide, un filament chauffé une poudre d'argent. Ainsi, quelques atomes d'argent vont pouvoir s'échapper de leur boîte et passer le diaphragme. Le dispo-

sitif est tel que les atomes sortant du diaphragme ont une trajectoire quasi-horizontale. Ensuite, si l'atome possède un moment magnétique, alors l'aimant va dévier sa trajectoire vers le haut ou vers le bas suivant son orientation.

L'énergie d'un atome dans ce champ  $\vec{B}$  est :

$$E = -\vec{M} \cdot \vec{B} = -M_z(B_0 + az)$$

D'où la force résultante selon  $z$  :

$$F_z = aM_z$$

En physique classique, on obtiendrait une répartition gaussienne de  $M_z$  centrée en  $z=0$  :

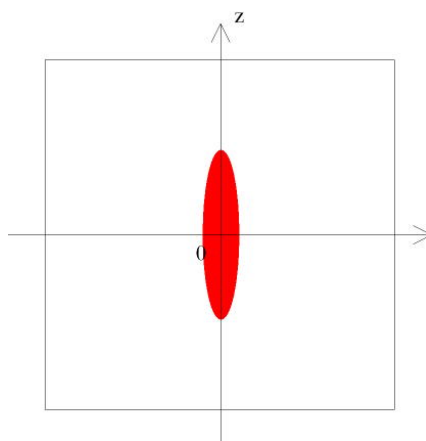


FIG. 3.2 – Résultat attendu en physique classique

Mais Stern et Gerlach ont obtenu :

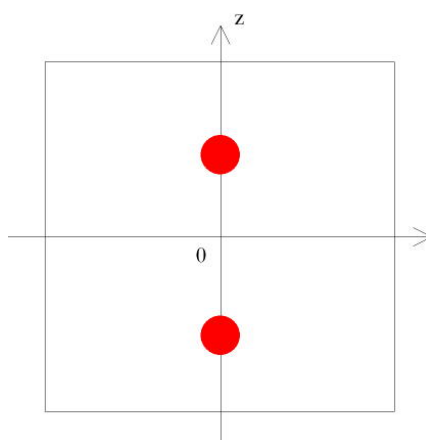


FIG. 3.3 – Résultat obtenu...

On a donc une quantification spatiale : on n'obtient pas une distribution continue de valeur de  $M_z$  mais deux valeurs seulement  $\pm\mu_B$  appelé "magnéton de Bohr".

### 3.3.2 Etats d'un spin 1/2

$\pm\mu_B$  est caractéristique du "spin 1/2".

On pose deux états :

-  $|+_z\rangle$  : vecteur d'état d'un électron donnant  $+\mu_B$

-  $|-_z\rangle$  : vecteur d'état d'un électron donnant  $-\mu_B$

Alors pour tout électron, le vecteur d'état s'écrit :

$$|\psi\rangle = \lambda |+_z\rangle + \mu |-_z\rangle$$

La probabilité d'aller sur la tache  $+\mu_B$  est donc :

$$|\langle+_z|\psi\rangle|^2 = |\lambda|^2$$



# Principes généraux de la mécanique quantique

## 4.1 Etats d'un système physique

### 4.1.1 Premier principe

**Théorème 1.** *Un système physique "parfaitement préparé" est décrit par un vecteur d'état  $|\psi\rangle$  appartenant à un espace de Hilbert  $E$ . L'espace de Hilbert considéré est un espace vectoriel à coefficients complexes muni d'un produit scalaire hermitien.*

*Le produit scalaire entre les ket  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  est noté  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$*

*Le ket  $|\psi\rangle$  décrivant un système physique est normé :*

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Grâce à la propriété de linéarité, on a le "principe de superposition" : si  $|\psi_1\rangle$  et  $|\psi_2\rangle$  sont deux états solutions, alors toute combinaison linéaire de ces vecteurs est solution (paradoxe du chat de Schrödinger).

Pour deux fonctions d'onde :

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)dx$$

E peut être muni d'une base orthonormée  $|f_n\rangle$  avec  $n \in \mathbb{N}$ , ou  $|\alpha\rangle$  avec  $\alpha \in \mathbb{R}$  :

$$\langle f_n | f_{n'} \rangle = \delta_{n'n} \text{ notation de Kronecker}$$

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha') \text{ notation de Dirac}$$

Ainsi, pour tout vecteur d'état  $|\psi\rangle$  :

$$|\psi\rangle = \sum \lambda_n |f_n\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda(\alpha) |\alpha\rangle d\alpha$$

### 4.1.2 Bra et ket

$|\psi_1\rangle$  est un ket de  $E$

$\langle\psi_2|$  est un bra de  $E^*$  l'espace dual des formes linéaires  $|\psi\rangle \in E \mapsto x \in \mathbb{C}$  Alors si on applique la forme linéaire  $\langle\psi_2|$  au vecteur  $|\psi_1\rangle$  de  $E$  :

$$\langle\psi_2|(|\psi_1\rangle) = \langle\psi_2|\psi_1\rangle$$

## 4.2 Grandeurs physiques

### 4.2.1 Principe P2

**Théorème 2.** *A toute grandeur physique mesurable  $\mathcal{A}$  est associé un opérateur linéaire hermitien (ou autoadjoint)  $\hat{A}$  appelé observable dont les vecteurs propres  $|u_n\rangle$  associés aux valeurs propres  $a_n$  forment une base orthonormée de l'espace des observables  $E$ .*

Soit  $|\psi\rangle$  une fonction d'onde alors :

– la position est donnée par :

$$\psi(x) \xrightarrow{\hat{X}} x\psi(x)$$

– l'impulsion est donnée par :

$$\psi(x) \xrightarrow{\hat{P}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial x}$$

Posons  $\hat{P}_n$  le projecteur sur le sous-espace propre associé à  $a_n$  :

$$\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n, \quad \hat{P}_n \hat{P}_{n'} = 0 \text{ si } n \neq n'$$

Si la valeur propre est non dégénérée ( $\dim E_n = 1$ ) :

$$\hat{P}_n = |u_n\rangle \langle u_n|, \quad \hat{P}_n |\psi\rangle = \langle u_n | \psi \rangle |u_n\rangle$$

Si la valeur propre est dégénérée ( $\dim E_n > 1$ ), avec  $\{|u_n^i\rangle\}$  base de  $E_n$  :

$$\hat{P}_n = \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$$

### 4.2.2 Mesure d'une grandeur physique

**Théorème 3.** *La mesure de  $\mathcal{A}$  ne peut donner comme résultat qu'une valeur propre de  $\hat{A}$  ( $a_n$  réels car  $\hat{A}$  est autoadjoint). Le résultat d'une mesure unique est aléatoire. Si on répète les mesures sur des systèmes préparés dans l'état  $|\psi\rangle$ , la probabilité de mesurer  $a_n$  vaut :*

$$P_{|\psi\rangle}(a_n) = \left\| \hat{P}_n |\psi\rangle \right\|^2$$

### 4.2.3 Conséquences

Si  $|\psi\rangle$  est un état propre de  $\hat{A}$  avec pour valeur propre  $a_{n_0}$  :

$$P_{|\psi\rangle}(a_n) = \left\| \hat{P}_n |u_{n_0}\rangle \right\|^2 = \begin{cases} 1 & \text{si } n = n_0 \\ 0 & \text{si } n \neq n_0 \end{cases}$$

Le résultat est donc certain.

Si la valeur propre est non dégénérée :

$$P_{|\psi\rangle}(a_n) = \left\| |u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle \right\|^2 = |\langle u_n|\psi\rangle|^2$$

Si la valeur propre est dégénérée :

$$P_{|\psi\rangle}(a_n) = \left\| \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i|\psi\rangle \right\|^2 = \sum_i |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$$

Lorsqu'on effectue la mesure de  $M_z$  (moment magnétique d'une particule suivant Oz), on a deux valeurs possibles  $\pm\mu_B$ . Comme  $\{|+_z\rangle, |-_z\rangle\}$  forme une BON de E, alors  $\hat{M}_z$  est diagonale dans cette base avec les valeurs propres (mesures possibles) sur sa diagonale :

$$\hat{M}_z = \begin{pmatrix} \mu_B & 0 \\ 0 & -\mu_B \end{pmatrix}$$

Lorsqu'on mesure la position  $x_0$  d'une particule associée à l'opérateur  $\hat{X}$ , au vecteur  $|x_0\rangle$  on associe la fonction  $\delta(x - x_0)$ . Ainsi :

$$\begin{aligned} \hat{X} |x_0\rangle &= x_0 |x_0\rangle \\ P_{|\psi\rangle}(x_0) &= |\langle x_0|\psi\rangle|^2 \\ &= \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) \psi(x) dx \right|^2 \\ &= |\psi(x_0)|^2 \end{aligned}$$

De même pour l'impulsion p.

### 4.2.4 Quelques relations utiles

Passage à l'espace dual :

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &\longmapsto \langle\psi| \\ \hat{O} |\psi\rangle &\longmapsto \langle\psi| \hat{O}^\dagger \\ \lambda |\psi\rangle &\longmapsto \lambda^* \langle\psi| \\ \lambda \hat{O}_1 \hat{O}_2 |\psi\rangle + \mu \hat{O}_3 |\psi'\rangle &\longmapsto \lambda^* \langle\psi| \hat{O}_2^\dagger \hat{O}_1^\dagger + \mu^* \langle\psi'| \hat{O}_3^\dagger \end{aligned}$$

Pour toute fonction d'onde  $|\psi\rangle$  :

$$|\psi\rangle = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int |\alpha\rangle \langle\alpha|\psi\rangle d\alpha$$

On en déduit les relations de fermeture :

$$\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| = \mathbf{1}$$

$$\int d\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha| = \mathbf{1}$$

#### 4.2.5 Valeur moyenne

La valeur moyenne de  $\mathcal{A}$  est :

$$\begin{aligned} \langle\mathcal{A}\rangle &= \sum_n a_n P_{|\psi\rangle}(a_n) \\ &= \sum_n a_n \left\| \hat{P}_n |\psi\rangle \right\|^2 \\ &= \sum_n a_n \langle\psi| \hat{P}_n \hat{P}_n |\psi\rangle \\ &= \sum_n a_n \langle\psi| \hat{P}_n |\psi\rangle \\ &= \sum_n \langle\psi| a_n (\hat{P}_n |\psi\rangle) \\ &= \sum_n \langle\psi| \hat{A} \hat{P}_n |\psi\rangle \\ &= \langle\psi| \hat{A} \sum_n \hat{P}_n |\psi\rangle \\ &= \langle\psi| \hat{A} |\psi\rangle \end{aligned}$$

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

Puis  $\Delta\mathcal{A} = \sqrt{\langle\mathcal{A}^2\rangle - \langle\mathcal{A}\rangle^2} = \sqrt{\langle(\mathcal{A} - \langle\mathcal{A}\rangle)^2\rangle}$   
 On pose  $\delta\mathcal{A} = \mathcal{A} - \langle\mathcal{A}\rangle$  l'opérateur fluctuation.

### 4.2.6 Commutation des observables

Même si on a  $\mathcal{AB} = \mathcal{BA}$ , on n'a pas forcément  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ . On introduit donc les opérateurs :

- commutateur :  $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$
- anticommutateur :  $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$

#### Exemple fondamental :

Dans l'espace des fonctions d'onde  $\psi(x)$  :

- $\hat{X} : \psi(x) \mapsto x\psi(x)$
- $\hat{P} : \psi(x) \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$

Alors :

- $\hat{P}\hat{X} : \psi(x) \mapsto \frac{\hbar}{i} \frac{\partial x\psi}{\partial x}$
- $\hat{X}\hat{P} : \psi(x) \mapsto x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x}$

Donc  $\hat{P}\hat{X} \neq \hat{X}\hat{P}$

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

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbf{1} \neq 0$$

#### Autre exemple :

- $m_z \mapsto \hat{M}_z = \begin{pmatrix} \mu_B & 0 \\ 0 & -\mu_B \end{pmatrix}$  sur la base  $\{|+_z\rangle, |-_z\rangle\}$
- $m_x \mapsto \hat{M}_x = \begin{pmatrix} \mu_B & 0 \\ 0 & -\mu_B \end{pmatrix}$  sur la base  $\{|+_x\rangle, |-_x\rangle\}$

Or  $|\pm_x\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|+_z\rangle \pm |-_z\rangle)$

Donc  $\hat{M}_x = \begin{pmatrix} 0 & \mu_B \\ \mu_B & 0 \end{pmatrix}$  sur la base  $\{|+_z\rangle, |-_z\rangle\}$

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_z] = 2\mu_B^2 \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \neq 0$$

#### Propriété :

Si  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , il existe une base de vecteurs propres communs à  $\hat{A}$  et  $\hat{B}$  dans l'espace des observable.

### 4.2.7 Ensemble complet d'observables qui commutent (ECOC) (chapitre tiré du Cohen-Tannoudji)

Considérons une observable  $A$ , et une base de  $\mathcal{E}$  constituée de vecteurs propres  $|u_n^i\rangle$  de  $A$ . Si aucune valeur propre de  $A$  n'est dégénérée, les divers vecteurs de base de  $\mathcal{E}$  peuvent être repérés par la valeur propre  $a_n$  (l'indice  $i$  dans  $|u_n^i\rangle$  est dans cas inutile). Tous les sous-espaces propres  $\mathcal{E}_n$  étant alors de dimension 1, la donnée de la valeur propre détermine de manière unique le vecteur propre correspondant (à un facteur multiplicatif près). En d'autres termes, il existe une seule base de  $\mathcal{E}$  formée des vecteurs propres de  $A$  (nous ne considérons pas comme distinctes deux bases dont les vecteurs sont proportionnels); on dit alors que l'observable  $A$  constitue un ECOC.

Si au contraire certaines valeurs propres de  $A$  sont dégénérées (il suffit que l'une d'elles le soit), la situation est différente : la donnée de  $a_n$  ne suffit plus toujours à caractériser un vecteur de base, puisqu'aux valeurs propres dégénérées correspondent plusieurs vecteurs indépendants. Dans ce cas, la base des vecteurs propres de  $A$  n'est évidemment plus unique : on peut en effet prendre n'importe quelle base à l'intérieur de chacun des sous-espaces propres  $\mathcal{E}_n$  de dimension supérieure à 1.

Prenons alors une autre observable  $B$  qui commute avec  $A$ , et construisons une base orthonormée de vecteurs propres communs à  $A$  et  $B$ . Par définition,  $A$  et  $B$  forment un ECOC si cette base est unique (à un facteur multiplicatif près pour chacun des vecteurs qui la constitue), c'est-à-dire si, à chacun des couples possibles de valeurs propres  $\{a_n, b_p\}$  il correspond un seul vecteur de base. Ainsi pour que  $A$  et  $B$  constitue un ECOC, il suffit que à l'intérieur de chacun des sous-espaces dégénérés  $\mathcal{E}_n$ , les valeurs propres  $b_n$  de  $B$  soient toutes distinctes pour chacun des vecteurs propres dégénérés de  $A$ .

Si pour au moins un des couples possibles  $\{a_n, b_p\}$ , il existe plusieurs vecteurs indépendants qui soient vecteurs propres de  $A$  et  $B$  avec ces valeurs propres, l'ensemble  $\{A, B\}$  n'est pas complet. Ajoutons-lui alors un troisième observable  $C$  qui commute à la fois avec  $A$  et avec  $B$ . On peut reprendre le même raisonnement que précédemment en le généralisant : lorsqu'au couple  $\{a_n, b_p\}$  correspond un seul vecteur, celui-ci est forcément un vecteur propre de  $C$ ; s'il en existe plusieurs, ils forment un sous-espace propre  $\mathcal{E}_{n,p}$  dans lequel il est possible de choisir une base constituée de vecteurs qui soient aussi vecteurs propres de  $C$ . On construit ainsi dans l'espace des états, une base orthonormée formée de vecteurs propres communs à  $A, B$  et  $C$ .  $A, B$  et  $C$  forment un ECOC si cette base est unique c'est-à-dire si la donnée d'un ensemble de valeurs propres  $\{a_n, b_p, c_r\}$  de  $A, B, C$  caractérise un seul vecteur propre de cette base. Si ce n'est pas le cas, il faut ajouter une observable  $D$  qui commute avec chacun des trois opérateurs et ainsi de suite.

*Un ensemble d'observables  $A, B, C, \dots$  est un ensemble complet d'observables qui commutent s'il existe une base orthonormée de vecteurs propres communs et si cette base est unique aux facteurs de phase près.*

Pour un système donné, il existe une infinité d'ECOC. Le choix de l'ECOC se fait pour chaque problème suivant des critères de simplicité pour classer les états de base du système. Ni la nature, ni le nombre des observables constituant un ECOC ne sont a priori fixés.

### 4.2.8 Inégalité de Heisenberg

Inégalité de Cauchy-Schwartz :

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \|\alpha\|^2 \|\beta\|^2$$

Soit  $|\psi\rangle$  quelconque :

$$\left| \langle \psi | \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle \right|^2 \leq \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle$$

Or

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B} &= \frac{1}{2}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} + \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}) = \frac{1}{2} \left( [\hat{A}, \hat{B}] + \{\hat{A}, \hat{B}\} \right) \\ \langle [\hat{A}, \hat{B}]^\dagger \rangle &= -\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \\ \langle \{\hat{A}, \hat{B}\}^\dagger \rangle &= \langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle \end{aligned}$$

Donc  $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \in i\mathbb{R}$  et  $\langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle \in \mathbb{R}$

Ainsi

$$\frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2 + \frac{1}{4} \left| \langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle \right|^2 \leq \langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle$$

Maintenant, si on remplace  $\hat{A}$  par  $\delta\hat{A}$  et  $\hat{B}$  par  $\delta\hat{B}$ , on retrouve  $[\delta\hat{A}, \delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$  et  $\frac{1}{2} \langle \delta\hat{A}\delta\hat{B} + \delta\hat{B}\delta\hat{A} \rangle$  est appelé fonction de corrélation  $C_{AB}$ .

Ainsi  $\Delta^2 \mathcal{A} \Delta^2 \mathcal{B} \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|^2 + C_{AB}^2$

$$\boxed{\Delta \mathcal{A} \Delta \mathcal{B} \geq \frac{1}{2} \left| \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right|}$$

Par exemple,  $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2} |i\hbar| = \frac{\hbar}{2}$

Si  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , alors seulement dans ce cas on peut avoir  $\Delta A = 0$  et  $\Delta B = 0$ . De plus, si  $|\psi\rangle$  est un état propre  $|u_n\rangle$  de  $\hat{A}$ , alors :

$$\begin{aligned} \hat{A} |u_n\rangle &= a_n |u_n\rangle \Rightarrow \langle \hat{A} \rangle = a_n \\ \hat{A}^2 |u_n\rangle &= a_n^2 |u_n\rangle \\ \langle \hat{A}^2 \rangle &= a_n^2 = \langle \hat{A} \rangle^2 \Rightarrow \Delta A = 0 \Rightarrow \Delta B \rightarrow +\infty \end{aligned}$$

## 4.3 Evolution temporelle

### 4.3.1 L'opérateur hamiltonien

Soit un système isolé ou soumis à des contraintes extérieures fixes, il existe une énergie classique  $\mathcal{E}_{cl}$  dépendant des paramètres du système  $\mathbf{x}, \mathbf{p}, \vec{M}, \dots$  et des contraintes  $\vec{B}, V(\mathbf{x}) \dots$  à laquelle est associé l'opérateur énergie ou hamiltonien :

$$\hat{H} = \mathcal{E}_{cl}(\hat{X}, \hat{P}, \hat{M}, \dots, \vec{B}, V(x), \dots)$$

Quand on ne sait pas si deux opérateurs commutent, on utilise la règle :

$$xp = px \longmapsto \frac{1}{2}(\hat{X}\hat{P} + \hat{P}\hat{X})$$

### 4.3.2 Equation de Schrödinger

**Théorème 4.** Si à  $t=0$  le système est dans l'état  $|\psi\rangle$ , à tout instant  $t$  il est alors dans l'état  $|\psi(t)\rangle$  tel que :

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= |\psi\rangle \\ i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle &= \hat{H} |\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

$\hat{H}$  peut dépendre du temps.

### 4.3.3 Eléments propres de $\hat{H}$

On se place dans le cas où  $\hat{H}$  est indépendant du temps.  $\hat{H}$  est un observable donc il existe  $|\phi_n\rangle$  et  $E_n$  (ici indépendants du temps) tels que :

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

Si on effectue une mesure de l'énergie du système, on ne peut trouver qu'une valeur propre  $E_n$  de  $\hat{H}$  d'où une discrétisation de l'énergie.

$$\begin{cases} \langle \phi_n | \hat{H}^\dagger = E_n^* \langle \phi_n | \\ \langle \phi_n | \hat{H} = E_n \langle \phi_n | \end{cases} \Rightarrow i\hbar \left\langle \phi_n \left| \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \right. \right\rangle = \langle \phi_n | \hat{H} |\psi(t)\rangle$$

Ainsi comme  $\phi_n$  est indépendant du temps :

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

$$\langle \phi_n | \psi(t)\rangle = \langle \phi_n | \psi(0)\rangle e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}}$$



On pose  $\omega_n = \frac{E_n}{\hbar}$

Or  $|\psi\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi \rangle$  donc :

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle \phi_n | \psi(0) \rangle e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |\phi_n\rangle$$

On pose  $\hat{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle$  l'opérateur d'évolution. Comme  $e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |\phi_n\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |\phi_n\rangle$ ,

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle \phi_n | \psi(0) \rangle e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |\phi_n\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(0)\rangle$$

Donc  $\hat{U}(t, 0) = e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$  si  $\hat{H}$  est indépendant du temps.

#### 4.3.4 Théorème d'Ehrenfest

Pour  $\mathcal{A}$  une grandeur physique, classiquement  $\mathcal{A}$  dépend du temps. Or si  $\hat{A}$  est indépendant du temps, on a quand même  $\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \hat{A} \rangle(t)$

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle(t) = \left( \frac{d}{dt} \langle \psi | \right) \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \left( \frac{d}{dt} | \psi \rangle \right)$$

Or  $-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \hat{H}^\dagger = \langle \psi(t) | \hat{H}$ . Alors après calcul, on obtient le théorème d'Ehrenfest :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle$$

## 4.4 La mesure dans le monde quantique

### 4.4.1 Exemples

#### Energie

On peut mesurer le niveau d'énergie d'un système par spectroscopie soit en étudiant la transmission optique du système soit l'absorption pour différentes longueurs d'onde.

#### Position

On peut mesurer la position par des méthodes optiques (microscope bien que "l'éclairage" perturbe le système), ou par des diaphragmes suivi de détecteurs de particules.

#### Impulsion

On peut mesurer l'impulsion par une double mesure de position, une mesure filtrante ou par une méthode optique (mesure de l'effet Doppler).

### 4.4.2 Mesures successives

**Théorème 5.** La probabilité de trouver un couple ordonné  $(a_m, b_n)$  de résultats pour les mesures des grandeurs successives  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$  sur un système décrit par sa fonction d'onde  $|\psi\rangle$  vaut :

$$P_{|\psi\rangle}(a_m, b_n) = \left\| \hat{Q}_n \hat{P}_m |\psi\rangle \right\|^2 = \langle \psi | \hat{P}_m \hat{Q}_n \hat{P}_m | \psi \rangle$$

#### Mesures successives de $\mathcal{A}$

$$P_{|\psi\rangle}(a_n, a_{n'}) = \langle \psi | \hat{P}_n \hat{P}_{n'} \hat{P}_n | \psi \rangle = \delta_{n'n} \left\| \hat{P}_n |\psi\rangle \right\|^2$$

On ne peut jamais mesurer deux valeurs propres différentes à la suite pour un même objet (rassurant...).

#### Mesure de $\mathcal{A}$ puis $\mathcal{B}$

$$\begin{aligned} P_{|\psi\rangle}(a_n) &= \sum_m P_{|\psi\rangle}(a_n, b_m) \\ &= \sum_m \langle \psi | \hat{P}_n \hat{Q}_m \hat{P}_n | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{P}_n \sum_m \hat{Q}_m \hat{P}_n | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle \quad \text{car } \sum_m \hat{Q}_m = \mathbf{1} \\ &= \left\| \hat{P}_n |\psi\rangle \right\|^2 \quad \text{comme prévu} \\ P_{|\psi\rangle}(b_m) &= \sum_n P_{|\psi\rangle}(a_n, b_m) \\ &= \sum_n \langle \psi | \hat{P}_n \hat{Q}_m \hat{P}_n | \psi \rangle \end{aligned}$$

Si  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ , il existe une base de vecteurs propres communs donc  $[\hat{P}_n, \hat{Q}_m] = 0$  et

$$P_{|\psi\rangle}(b_m) = \left\| \hat{Q}_m |\psi\rangle \right\|^2$$

. La mesure de  $\mathcal{A}$  ne perturbe pas la mesure  $\mathcal{B}$  qui suit.

Si  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ , alors  $[\hat{P}_n, \hat{Q}_m] \neq 0$  a priori et :

$$P_{|\psi\rangle}(b_m \text{ après mesure de } a_n) \neq P_{|\psi\rangle}(b_m \text{ seul})$$

$$P_{|\psi\rangle}(a_n, b_m) \neq P_{|\psi\rangle}(b_m, a_n)$$

Le résultat des mesures dépend alors de l'ordre dans lequel elle sont opérées.

### 4.4.3 Mesure conditionnelle

Après avoir fait une mesure de  $\mathcal{A}$  et obtenu  $a_{n_0}$ , la probabilité de trouver ensuite  $b_n$  connaissant  $a_{n_0}$  est :

$$P_{|\psi\rangle}(b_n \| a_{n_0}) = \frac{P_{|\psi\rangle}(a_{n_0}, b_m)}{P_{|\psi\rangle}(a_{n_0})}$$

### 4.4.4 Etat conditionnel du système

**Théorème 6.** *Après une mesure de  $\mathcal{A}$  donnant comme résultat  $a_{n_0}$ , le système est dans l'état :*

$$\boxed{|\psi_{a_{n_0}}^{cond}\rangle = \frac{\hat{P}_{n_0} |\psi\rangle}{\|\hat{P}_{n_0} |\psi\rangle\|}}$$

Ensuite, les probabilités de mesures de nouvelles grandeurs physiques sur cet état conditionnel sont égales aux probabilités conditionnelles.

Par exemple, pour  $\hat{X}$ , après avoir mesuré la position  $x_0$  du système, celui-ci est dans l'état  $\psi_{x_0} = \delta(x - x_0)$ . On dit qu'on a effondrement du paquet d'onde.

### 4.4.5 Exemple d'effet physique de l'appareil de mesure

En ce qui concerne la mesure de la position ou de l'impulsion (par des diaphragmes par exemple), plus la précision sur la mesure de la position sera grande (fente étroite), plus la précision de la mesure l'impulsion sera faible (inégalité d'Heisenberg) et inversement.

Par exemple, dans l'expérience des trous d'Young, on sait qu'on obtient une figure d'interférences si et seulement si on ne cherche pas à savoir dans quel trou est passé la particule. Lorsqu'on cherche cela, alors bizarrement la figure d'interférences disparaît et on retrouve ce qui serait attendu classiquement.

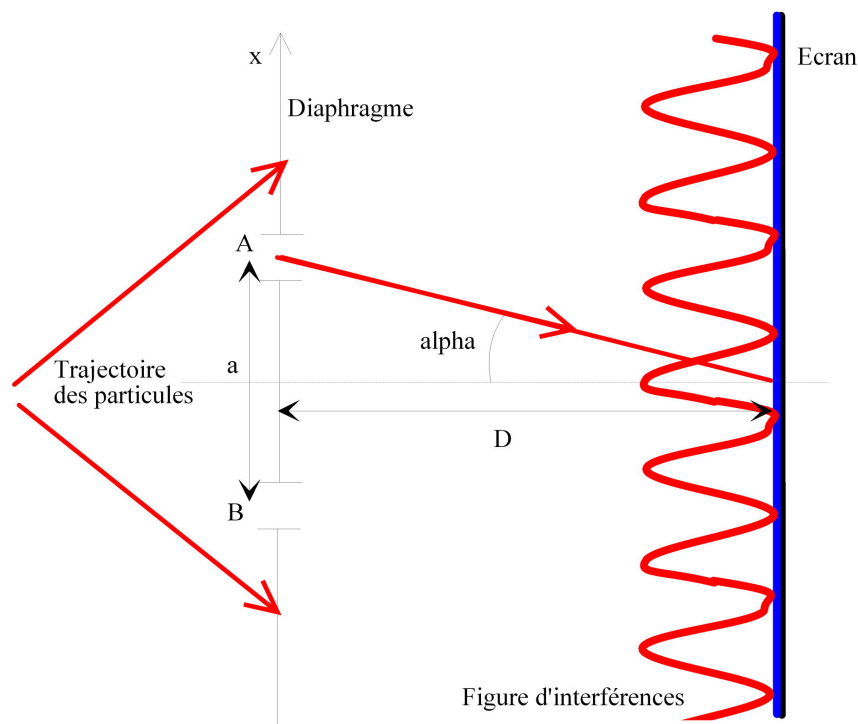


FIG. 4.1 – Expérience des trous d'Young avec des particules

En effet, on a :

$$p_x = \hbar k \sin \alpha \approx \begin{cases} \hbar k \alpha & \text{si A} \\ -\hbar k \alpha & \text{si B} \end{cases}$$

Or pour savoir dans quel trou est passé la particule, on mesure l'impulsion à l'écran. Il faut donc

$$\begin{aligned} \Delta p_x \ll \hbar k \alpha &\Leftrightarrow \Delta x \gg \frac{1}{2k\alpha} \quad \text{d'après l'inégalité d'Heisenberg} \\ &\Leftrightarrow \Delta x \gg \frac{\lambda}{2\pi} \frac{D}{a} \\ &\Leftrightarrow \Delta x \gg i \quad \text{l'interfrange} \end{aligned}$$

La précision demandée pour savoir dans quel trou est passée la particule provoque une très grande incertitude sur la mesure de la position d'arrivée sur l'écran de celle-ci, bien supérieure à la taille de l'interfrange, ce qui brouille la figure d'interférences observée par l'écran.

# Oscillateur harmonique à une dimension

## 5.1 Rappel classique

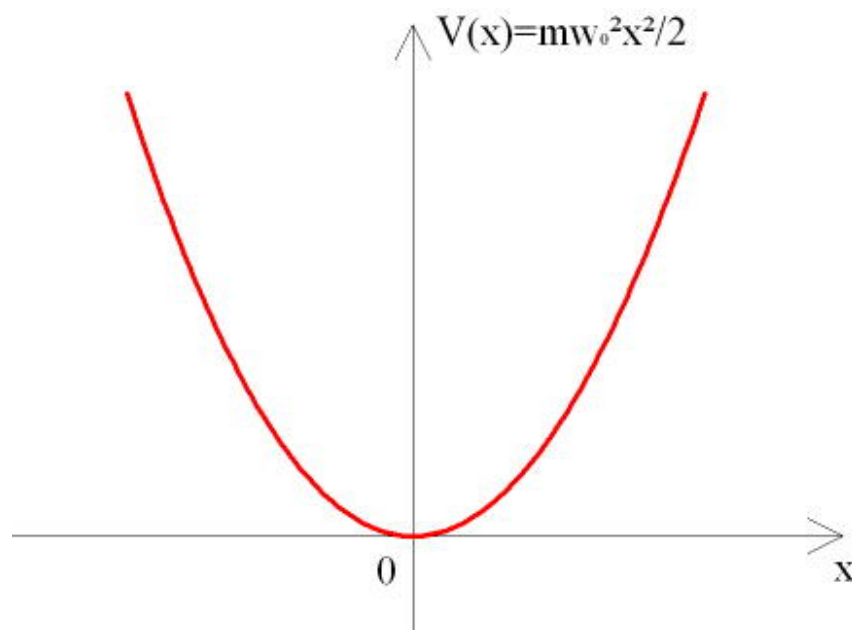


FIG. 5.1 – Potentiel harmonique

Les équations du mouvement d'une particule de masse  $m$  dans un potentiel harmonique de la forme  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$  sont :

$$\begin{cases} x = x_0 \cos(\omega_0 t + \phi) \\ p = -m\omega_0 x_0 \sin(\omega_0 t + \phi) \end{cases}$$

L'énergie minimale pour un tel système est atteinte pour  $E=0$  avec  $x_0 = 0$ .

## 5.2 Approche fonction d'onde

On recherche des solutions stationnaires à l'équation de Schrödinger de la forme  $\psi(x, t) = \phi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$  dans un potentiel harmonique  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2$  :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\phi''(x) + V(x)\phi(x) = E\phi(x)$$

$\phi$  est de carré sommable. Or les solutions de carré sommable pour cette équation n'existe que si :

$$E = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$$

D'où les solutions :

$$\phi_n(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n! a}} H_n\left(\frac{x}{a}\right) e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$$

avec  $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$  et  $H_n$  le polynôme de Hermite de degré  $n$ .

A l'état fondamental ( $n=0$ ), on a :

- $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \neq 0$
- $\phi_0(x) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \Rightarrow \Delta x = \frac{a}{\sqrt{2}}$
- $\tilde{\psi}_0(p) = \pi^{-\frac{1}{4}} \frac{a}{\sqrt{\hbar}} e^{-\frac{a^2 p^2}{2\hbar^2}} \Rightarrow \Delta p = \frac{\hbar}{a\sqrt{2}}$

On a donc  $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ . Mais pourquoi  $E_0 \neq 0$ ? On a  $\langle x \rangle = 0$  et  $\langle p \rangle = 0$  donc  $\langle x^2 \rangle = \Delta^2 x$  et  $\langle p^2 \rangle = \Delta^2 p \approx \frac{\hbar^2}{\Delta^2 x}$  par l'inégalité d'Heisenberg. Donc :

$$\langle E \rangle = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \langle x^2 \rangle \approx \frac{\hbar^2}{2m\Delta^2 x} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \Delta^2 x$$

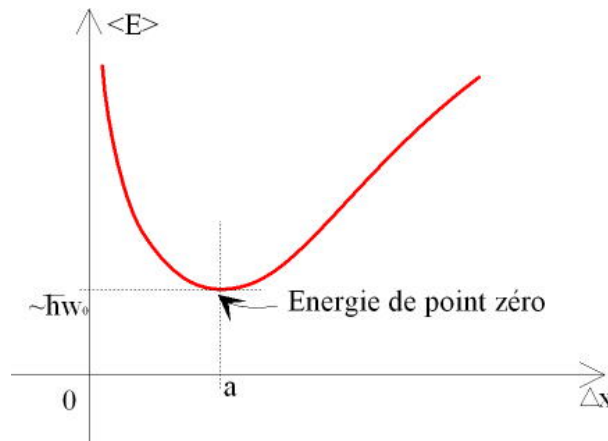


FIG. 5.2 – Existence d'un minimum non nul pour l'énergie moyenne d'une particule dans un potentiel harmonique

## 5.3 Approche matricielle

### 5.3.1 Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2$$

On pose  $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}$  et  $p_0 = \frac{\hbar}{a}$ . Avec  $\hat{X} = \frac{\hat{x}}{a}$  et  $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{p_0}$ , on obtient :

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega_0}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2), \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i$$

### 5.3.2 Opérateurs $\hat{a}, \hat{a}^\dagger, \hat{N}$

On pose  $\hat{a}$  l'opérateur annihilation et  $\hat{a}^\dagger$  l'opérateur de création :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbf{1}$$

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$$

On a  $\hat{a} \neq \hat{a}^\dagger$  donc leurs valeurs propres ne sont pas réels a priori. Mais  $\hat{N} = \hat{N}^\dagger$  donc les valeurs propres de  $\hat{N}$  sont réelles. De plus, comme  $\hat{N} = \frac{1}{2}(\hat{P}^2 + \hat{X}^2 - 1)$ , on a :

$$\hat{H} = \hbar\omega_0(\hat{N} + \frac{1}{2}) = \hbar\omega_0(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \frac{1}{2})$$

### 5.3.3 Eléments propres de $\hat{N}$

**Valeurs propres : démonstration tirée de *Mécanique quantique*, p.497 de Claude Cohen-Tannoudji**

**Lemme 1.** *Propriété des valeurs propres de  $\hat{N}$  :*

*Les valeurs propres  $\nu$  de l'opérateur  $\hat{N}$  sont positives ou nulles.*

Considérons en effet un vecteur propre  $|\phi_\nu\rangle$  quelconque de  $\hat{N}$ , et écrivons que le carré de la norme du vecteur  $a|\phi_\nu\rangle$  est positif ou nul :

$$\begin{aligned} \|a|\phi_\nu\rangle\|^2 &= \langle\phi_\nu|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\phi_\nu\rangle \geq 0 \\ &= \langle\phi_\nu|\hat{N}|\phi_\nu\rangle \\ &= \nu\langle\phi_\nu|\phi_\nu\rangle \\ &= \nu \geq 0 \end{aligned}$$

**Lemme 2.** *Propriétés du vecteur  $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$*

*Soit  $|\phi_\nu\rangle$  un vecteur propre (non nul) de  $\hat{N}$ , de valeur propre  $\nu$  :*

1. *Si  $\nu = 0$ , le ket  $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$  est nul*
2. *Si  $\nu > 0$ , le ket  $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$  est un vecteur propre non-nul de  $\hat{N}$ , de valeur propre  $\nu - 1$*
1.  $\|\hat{a}|\phi_\nu\rangle\|^2 = 0$  si  $\nu = 0$  d'après le lemme précédent donc  $\hat{a}|\phi_{\nu=0}\rangle = 0$
2. Supposons maintenant  $\nu > 0$ . D'après le lemme précédent, alors  $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$  est alors non nul puisque sa norme est strictement positive.

Or on a  $[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}$  donc :

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}]|\phi_\nu\rangle &= -\hat{a}|\phi_\nu\rangle \\ \Leftrightarrow \hat{N}\hat{a}|\phi_\nu\rangle &= \hat{a}\hat{N}|\phi_\nu\rangle - \hat{a}|\phi_\nu\rangle \\ \Leftrightarrow \hat{N}\hat{a}|\phi_\nu\rangle &= \hat{a}\nu|\phi_\nu\rangle - \hat{a}|\phi_\nu\rangle \\ \Leftrightarrow \hat{N}\hat{a}|\phi_\nu\rangle &= (\nu - 1)\hat{a}|\phi_\nu\rangle \end{aligned}$$

ce qui démontre que  $\hat{a}|\phi_\nu\rangle$  est vecteur propre de  $\hat{N}$  de valeur propre associée  $\nu - 1$

**Lemme 3.** *Propriétés du vecteur  $\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle$  :*

*Soit  $|\phi_\nu\rangle$  un vecteur propre (non nul) de  $\hat{N}$ , de valeur propre  $\nu$  :*

1.  $\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle$  est toujours non nul.
2.  $\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle$  est un vecteur propre non-nul de  $\hat{N}$ , de valeur propre  $\nu + 1$
1. De la même manière que précédemment :

$$\|\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle\|^2 = \langle\phi_\nu|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle = \langle\phi_\nu|\hat{N} + 1|\phi_\nu\rangle = (\nu + 1)$$

D'après le lemme 1, comme  $\nu \geq 0$ , le ket  $\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle$  a toujours une norme strictement positive donc n'est jamais nul.

2. De la même manière que précédemment, comme on a  $[\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$  :

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}^\dagger]|\phi_\nu\rangle &= \hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle \\ \Leftrightarrow \hat{N}\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle &= \hat{a}^\dagger\hat{N}|\phi_\nu\rangle + \hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle \\ \Leftrightarrow \hat{N}\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle &= \hat{a}^\dagger\nu|\phi_\nu\rangle + \hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle \\ \Leftrightarrow \hat{N}\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle &= (\nu + 1)\hat{a}^\dagger|\phi_\nu\rangle \end{aligned}$$



Maintenant, utilisons ces lemmes pour montrer que les valeurs propres de  $\hat{N}$  sont les entiers naturels.

D'après le lemme A,  $\nu \geq 0$ . Supposons tout d'abord que  $\nu$  n'est pas entier. Nous allons montrer qu'une telle hypothèse est contradictoire avec le lemme 1 grâce aux lemmes 2 et 3, et doit par suite être exclue. Si  $\nu$  n'est pas entier, on peut trouver un entier  $n \geq 0$  tel que :

$$n < \nu < n + 1$$

D'après le lemme 2, chacun des vecteurs  $\hat{a}^p |\phi_\nu\rangle$  pour  $0 \leq p \leq n$  est non-nul et vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre  $\nu - p$ .

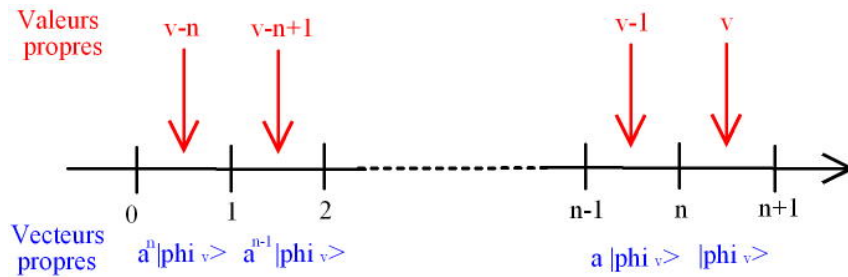


FIG. 5.3 – En faisant agir l'opérateur  $\hat{a}$  plusieurs fois sur  $|\phi_\nu\rangle$ , on construit des vecteurs propres de  $\hat{N}$  de valeurs propres  $\nu - 1, \nu - 2$ , etc...

La démonstration se fait de proche en proche :  $|\phi_\nu\rangle$  est non nul par hypothèse ;  $\hat{a}^p |\phi_\nu\rangle$  est non nul (car  $\nu > 0$ ) et correspond à la valeur propre  $\nu - 1$  de  $\hat{N}$ ... ;  $\hat{a}^p |\phi_\nu\rangle$  s'obtient par action de  $\hat{a}$  sur  $\hat{a}^{p-1} |\phi_\nu\rangle$ , vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre  $\nu - p + 1$  strictement positive, puisque  $p \leq n$  et que  $\nu > n$ .

Faisons maintenant agir  $\hat{a}$  sur le ket  $\hat{a}^n |\phi_\nu\rangle$ . Comme  $\nu - n > 0$ , l'action de  $\hat{a}$  sur  $\hat{a}^n |\phi_\nu\rangle$  donne un vecteur non nul (lemme 2) ; de plus, toujours d'après le lemme 2,  $\hat{a}^{n+1} |\phi_\nu\rangle$  est alors vecteur propre de  $\hat{N}$  de valeur propre associée  $\nu - n - 1$ , strictement négative. Si  $\nu$  est non entier, nous pouvons donc construire un vecteur propre non nul de  $\hat{N}$  avec une valeur propre strictement négative. Comme ceci est impossible d'après le lemme 1, l'hypothèse que  $\nu$  est non-entier est à rejeter.

Que se passe-t-il maintenant si  $\nu = n$  avec  $n \in \mathbb{N}$  ?  $\hat{a}^n |\phi_n\rangle$  est non-nul et vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre 0 (ce qui est autorisé par le lemme 1). D'après le lemme 2, on a donc que  $\hat{a}^{n+1} |\phi_n\rangle = 0$ . La suite de vecteurs obtenue par action répétée de l'opérateur  $\hat{a}$  sur  $|\phi_n\rangle$  est donc limitée lorsque  $n$  est entier ; on ne peut alors jamais obtenir un vecteur propre non nul associé à une valeur propre strictement négative.

En conclusion,  $\nu$  ne peut être qu'un entier  $n$  non-négatif.

On peut alors utiliser le lemme 3 pour montrer que le spectre de  $\hat{N}$  comprend effectivement tous les entiers positifs ou nuls. Nous avons en effet construit plus haut un vecteur propre de  $\hat{N}$  de valeur propre 0 ( $\hat{a}^n |\phi_n\rangle$ ) ; il suffit alors de faire agir  $(\hat{a}^\dagger)^k$  sur un tel vecteur pour obtenir un vecteur propre de  $\hat{N}$  avec la valeur propre  $k$  où  $k$  est un entier positif quelconque.

**Vecteurs propres**

Comme  $\hat{N}|\phi_0\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|\phi_0\rangle = 0$ , on a  $\|\hat{a}|\phi_0\rangle\|^2 = 0 \Rightarrow \hat{a}|\phi_0\rangle = 0$ .

$$\begin{aligned}\hat{a}|\phi_0\rangle = 0 &\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})|\phi_0\rangle = 0 \\ &\Leftrightarrow X\phi_0(X) + i\frac{1}{i}\frac{d}{dX}\phi_0(X) = 0 \\ &\Leftrightarrow \phi_0'(X) = -X\phi_0(X) \\ &\Leftrightarrow \phi_0(X) = \pi^{-1/4}e^{-\frac{X^2}{2}}\end{aligned}$$

Le sous-espace propre  $\mathcal{E}_0$  associé à la valeur propre  $n=0$  est donc de dimension 1.

De plus,  $\hat{N}\hat{a}|\phi_1\rangle = (1-1)\hat{a}|\phi_1\rangle = 0$  donc  $\hat{a}|\phi_1\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{N}$  de valeur propre 0 donc  $\hat{a}|\phi_1\rangle \in \mathcal{E}_0 \Leftrightarrow \hat{a}|\phi_1\rangle = \lambda|\phi_0\rangle$ . Ainsi  $|\phi_1\rangle = \hat{a}^\dagger\hat{a}|\phi_1\rangle = \lambda\hat{a}^\dagger|\phi_0\rangle$ . Le sous-espace propre  $\mathcal{E}_1$  associé à la valeur propre  $n=1$  est donc de dimension 1.

Cherchons maintenant la valeur de  $\lambda$  :

$$\begin{aligned}\langle\phi_1|\phi_1\rangle = 1 &\Leftrightarrow |\lambda|^2\langle\phi_0|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\phi_0\rangle = 1 \\ &\Leftrightarrow |\lambda|^2 = 1 \quad \text{avec } \hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1 = \hat{N} + 1\end{aligned}$$

On a donc  $\lambda = \pm 1$ , or les solutions stationnaires sont valables à une phase près donc on choisit  $\lambda = 1$  et  $|\phi_1\rangle = \hat{a}^\dagger|\phi_0\rangle$ . Par récurrence, avec  $\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle = \lambda_n|\phi_{n+1}\rangle$ , on obtient :

$$\begin{aligned}\langle\phi_n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle &= |\lambda_n|^2\langle\phi_{n+1}|\phi_{n+1}\rangle \\ &\Leftrightarrow n+1 = |\lambda_n|^2 \\ &\Leftrightarrow \lambda_n = \sqrt{n+1}\end{aligned}$$

Donc

$$|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^\dagger|\phi_n\rangle$$

De même, avec  $\hat{a}|\phi_n\rangle = \mu_n|\phi_{n-1}\rangle$ , on obtient :

$$\begin{aligned}\langle\phi_n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\phi_n\rangle &= |\mu_n|^2\langle\phi_{n-1}|\phi_{n-1}\rangle \\ &\Leftrightarrow n = |\mu_n|^2 \\ &\Leftrightarrow \mu_n = \sqrt{n}\end{aligned}$$

Donc

$$\hat{a}|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle, \quad \text{avec } \hat{a}|\phi_0\rangle = 0$$

**Niveaux d'énergie**

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = \hbar\omega_0(\hat{N} + \frac{1}{2}) |\phi_n\rangle = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2}) |\phi_n\rangle$$

On a donc, pour l'oscillateur harmonique :

$$E_n = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2})$$

**Fonctions propres  $|\phi_n\rangle$** 

$$|\phi_{n+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \hat{a}^\dagger |\phi_n\rangle \Rightarrow |\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^\dagger |\phi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^\dagger)^n |\phi_0\rangle$$

On en déduit les fonctions propres :

$$\phi_n(X) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( X - i \frac{1}{i} \frac{d}{dX} \right) \right]^n \phi_0(X) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}} \left( X - \frac{d}{dX} \right) \right]^n \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{X^2}{2}}$$



# Chapitre 6

## Le moment cinétique

### 6.1 Rappel classique

Dans un espace classique à 3 dimensions, pour une particule ponctuelle, le moment cinétique est :

$$\vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p}$$
$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{M}_{\text{forces} \rightarrow \text{particule}}$$

Pour un système isolé à force centrale,  $\vec{M} = \vec{0}$  donc  $\vec{L}$  est constant. Pour un mouvement circulaire,  $\vec{L} = I\vec{\Omega}$  avec I le moment d'inertie  $mr^2$ .

Le moment magnétique est :

$$\vec{m} = \frac{q}{2m} \vec{L}$$

### 6.2 Opérateur moment cinétique

On se place dans l'espace des fonctions d'onde à 3D  $\psi(x, y, z, t)$ . On définit alors les opérateurs :

$$\hat{x} = x \quad \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$
$$\hat{y} = y \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}$$
$$\hat{z} = z \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

On a alors les relations de commutation :

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_y] = [\hat{x}, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{y}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_z] = 0$$

$$[\hat{z}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_x] = 0$$

### 6.2.1 Définition 1

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \wedge \hat{\vec{p}}$$

$$\begin{pmatrix} \hat{L}_x \\ \hat{L}_y \\ \hat{L}_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{x} \\ \hat{y} \\ \hat{z} \end{pmatrix} \wedge \begin{pmatrix} \hat{p}_x \\ \hat{p}_y \\ \hat{p}_z \end{pmatrix}$$

### 6.2.2 Relations de commutation

Après calculs, on obtient :

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \text{ et permutations circulaires}$$

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_i] = 0, \forall i \in \{x, y, z\}$$

### 6.2.3 Definition 2

Soit  $\hat{\vec{J}}$  un opérateur vectoriel hermitien. Alors  $\hat{\vec{J}}$  est un moment cinétique si et seulement si  $[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$  (et permutations circulaires). Soit  $\hat{\vec{J}}_1$  et  $\hat{\vec{J}}_2$  deux moments cinétiques tels que  $\forall (i, l) \in \{x, y, z\}, [\hat{J}_{1i}, \hat{J}_{2l}] = 0$ , alors  $\hat{\vec{J}}_1 + \hat{\vec{J}}_2$  est un moment cinétique.

### 6.2.4 Eléments propres de $\hat{\vec{J}}^2$ et $\hat{J}_z$

Soit  $|\tau, j, m\rangle$  un vecteur propre de  $\hat{\vec{J}}^2$  tel que :

$$\hat{\vec{J}}^2 |\tau, j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |\tau, j, m\rangle \text{ avec } j \geq 0$$

$$\hat{J}_z |\tau, j, m\rangle = m\hbar |\tau, j, m\rangle \text{ avec } m \in \mathbb{R}$$

$$\langle \tau, j, m | \tau', j', m' \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \delta_{\tau'\tau} \text{ (BON)}$$

On introduit :

$$\begin{cases} \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y \\ \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y \end{cases}$$

Grâce aux relations de commutation avec ces nouveaux opérateurs, on montre que :

- $\hat{J}_\pm |\tau, j, m\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{\vec{J}}^2$  associé à la valeur propre  $j(j+1)\hbar^2$
- $\hat{J}_+ |\tau, j, m\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{J}_z$  associé à la valeur propre  $\hbar(m+1)$  ( $\hat{J}_+$  est l'opérateur qui permet de monter dans les valeurs propres)
- $\hat{J}_- |\tau, j, m\rangle$  est un vecteur propre de  $\hat{J}_z$  associé à la valeur propre  $\hbar(m-1)$  ( $\hat{J}_-$  est l'opérateur qui permet de descendre dans les valeurs propres)

Avec  $\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \tau, j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ | \tau, j, m \rangle &= \left\| \hat{J}_+ | \tau, j, m \rangle \right\|^2 \geq 0 \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 - m) \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1) \end{aligned}$$

Donc  $m \in [-j-1, j]$

Avec  $\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z$ , on obtient :

$$\begin{aligned} \langle \tau, j, m | \hat{J}_+ \hat{J}_- | \tau, j, m \rangle &= \left\| \hat{J}_- | \tau, j, m \rangle \right\|^2 \geq 0 \\ &= \hbar^2 (j(j+1) - m^2 + m) \\ &= \hbar^2 (j+m)(j-m+1) \end{aligned}$$

Donc  $m \in [-j, j+1]$

Conclusion :

$$m \in [-j, j]$$

### 6.2.5 Valeurs de j et m

Grâce aux opérateurs  $\hat{J}_+$  et  $\hat{J}_-$ , on montre qu'il existe des états  $|\tau, j, m\rangle$  orthonormés avec j demi-entier positif et  $m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ . On a donc  $m \in [[-j, j]]$  à un facteur  $\frac{1}{2}$  près, soit  $2j+1$  valeurs de m.

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 | \tau, j, m \rangle &= j(j+1) \hbar^2 | \tau, j, m \rangle \\ \hat{J}_z | \tau, j, m \rangle &= m \hbar | \tau, j, m \rangle \\ \hat{J}_+ | \tau, j, m \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} | \tau, j, m+1 \rangle \\ \hat{J}_- | \tau, j, m \rangle &= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} | \tau, j, m-1 \rangle \end{aligned}$$

## 6.3 Moment cinétique intrinsèque : spin

### 6.3.1 Expériences

Pour expliquer les observations, les particules élémentaires sont caractérisées par :

- leur position  $\vec{r}$
- leur impulsion  $\vec{p}$
- l'opérateur  $\hat{S}$  moment cinétique avec  $\hat{S}^2$  de valeur fixe  $s(s+1)$  (s fixe) tel que le moment cinétique de la particule soit :

$$\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} = \vec{r} \wedge \vec{p} + \hat{S}$$

et son moment magnétique :

$$\hat{m} = \gamma \hat{S}$$

avec  $\gamma$  le rapport gyromagnétique.

### 6.3.2 Spin 1/2

Pour une particule de spin  $\frac{1}{2}$  tel que le proton, le neutron ou l'électron, les états possibles sont :

$$\begin{aligned} \left| \tau, j = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2} \right\rangle &= |-\rangle \\ \left| \tau, j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2} \right\rangle &= |+\rangle \end{aligned}$$

On obtient alors :

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |\pm\rangle &= \frac{3}{4} \hbar^2 |\pm\rangle \\ \hat{J}_z |\pm\rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} |\pm\rangle \\ \hat{J}_+ |+\rangle &= 0 \\ \hat{J}_+ |-\rangle &= \hbar |+\rangle \\ \hat{J}_- |-\rangle &= 0 \\ \hat{J}_- |+\rangle &= \hbar |-\rangle \end{aligned}$$

On a deux états possibles : l'espace de Hilbert est donc de dimension 2 de base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , bien que le spin représente un moment cinétique intrinsèque d'une particule donc un vecteur dans un espace à 3 dimensions. Avec les relations  $|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z \pm |-\rangle_z)$  et  $|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_z \pm i |-\rangle_z)$

$$\begin{aligned} \hat{J}_z &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_x &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_y &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_+ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{J}_- &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$



## 6.4 Résonance magnétique

### 6.4.1 Dispositif expérimental

On excite une particule avec un champ magnétique de la forme (dans la base  $\{\vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z\}$ ) :

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} B_1 \cos \omega t \\ B_1 \sin \omega t \\ B_0 \end{pmatrix}$$

Le moment magnétique de la particule est alors :

$$i\vec{m} = \gamma \vec{S}$$

L'hamiltonien d'une particule dans un champ magnétique est :

$$\hat{H} = -\vec{m} \cdot \vec{B} = \omega_0 \hat{S}_z + \omega_1 (\hat{S}_x \cos \omega t + \hat{S}_y \sin \omega t)$$

avec  $\omega_0 = -\gamma B_0$  et  $\omega_1 = -\gamma B_1$ .

### 6.4.2 Evolution de $\langle \vec{S} \rangle$

D'après le théorème de Ehrenfest :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \hat{S} \rangle_x = \langle [\hat{S}_x, \hat{H}] \rangle = \omega_0 (-i\hbar \langle \hat{S}_y \rangle) + \omega_1 \sin(\omega t) i\hbar \langle \hat{S}_z \rangle$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \hat{S}_x \rangle = -\omega_0 \langle \hat{S}_y \rangle + \omega_1 \sin(\omega t) \langle \hat{S}_z \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}_y \rangle = \omega_0 \langle \hat{S}_x \rangle - \omega_1 \cos(\omega t) \langle \hat{S}_z \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}_z \rangle = -\omega_1 \sin(\omega t) \langle \hat{S}_x \rangle + \omega_1 \cos(\omega t) \langle \hat{S}_y \rangle \end{cases}$$

Dans le référentiel tournant avec  $\vec{B}_1$  :

$$\begin{cases} \hat{S}'_x = S_x \cos \omega t + S_y \sin \omega t \\ \hat{S}'_y = -S_x \sin \omega t + S_y \cos \omega t \\ \hat{S}'_z = \hat{S}_z \end{cases}$$

On en déduit après calculs :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \hat{S}'_x \rangle = (\omega - \omega_0) \langle \hat{S}'_y \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}'_y \rangle = -(\omega - \omega_0) \langle \hat{S}'_x \rangle - \omega_1 \langle \hat{S}'_z \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}'_z \rangle = \omega_1 \langle \hat{S}'_y \rangle \end{cases}$$

Supposons que à  $t=0$ ,

$$\begin{cases} \langle \hat{S}'_z \rangle = S_0 \\ \langle \hat{S}'_y \rangle = \langle \hat{S}'_x \rangle = 0 \end{cases}$$

Si  $|\omega - \omega_0| \gg \omega_1$ , pour tout instant  $t$   $\langle \hat{S}'_y \rangle = \langle \hat{S}'_x \rangle \approx 0$

Si  $\omega = \omega_0$  :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \langle \hat{S}'_x \rangle = 0 \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}'_y \rangle = -\omega_1 \langle \hat{S}'_z \rangle \\ \frac{d}{dt} \langle \hat{S}'_z \rangle = \omega_1 \langle \hat{S}'_y \rangle \end{cases} \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{S}'_y \rangle + \omega_1^2 \langle \hat{S}'_y \rangle = 0$$

Donc :

$$\begin{cases} \langle \hat{S}'_z \rangle = S_0 \cos \omega_1 t \\ \langle \hat{S}'_y \rangle = -S_0 \sin \omega_1 t \end{cases}$$

On a donc que le vecteur de spin ou de moment magnétique de la particule tourne à la pulsation  $\omega_1$  dans le plan  $(zOy')$  tournant à  $\omega_0$  avec  $\vec{B}_1$ . Cette rotation peut induire un courant dans une bobine qui sert de détecteur et qui permettra d'en déduire  $\gamma$  avec  $\omega_0 = \gamma B_0$ .  $\gamma$  étant caractéristique de chaque espèce chimique voire même isotope, on peut ainsi faire une analyse isotopique d'un mélange en réperant les différentes résonances induites par un champ  $\vec{B}_1$  tournant à la pulsation  $\omega$ . De plus,  $\gamma$  dépend légèrement de la liaison chimique et l'amplitude du courant induit à la résonance pour une espèce est proportionnelle à sa concentration. Enfin, en appliquant un champ inhomogène (gradient de champ), on peut faire cette analyse sur différentes profondeurs : c'est l'IRM.

## 6.5 Moment cinétique orbital

### 6.5.1 Valeurs propres de $\hat{L}_z, \hat{L}^2$

En coordonnées sphériques :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \left( s \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Soit  $\phi_m(r, \theta, \phi)$  une fonction propre de  $\hat{L}_z$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \phi_m(r, \theta, \phi) = m \hbar \phi_m(r, \theta, \phi)$$

$$\phi_m(r, \theta, \phi) = \phi_m(r, \theta, 0) e^{im\phi}$$

Or  $\phi_m(r, \theta, \phi) = \phi_m(r, \theta, \phi + 2\pi)$  donc  $e^{im2\pi} = 1$  donc  $m$  est entier donc  $j$  est entier.

### 6.5.2 Harmoniques sphériques

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

$\hat{L}^2$  ne dépend pas de  $\frac{\partial}{\partial r}$

$$\hat{L}_{\pm} = \hbar e^{i\phi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

Il existe des vecteurs propres indépendants de  $r$ . On pose  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  les harmoniques sphériques :

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \phi) &= l(l+1) \hbar^2 Y_{lm}(\theta, \phi), \quad l \in \mathbb{N} \\ \hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \phi) &= m \hbar Y_{lm}(\theta, \phi), \quad m \in [[-l, l]] \\ \int |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 d\Omega &= 1 \\ Y_{lm}(\theta, \phi) &= e^{im\phi} Y_{lm}(\theta, 0) \end{aligned}$$

Pour  $l=0$ , on a donc  $Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$  : l'orbite suivie est un cercle.

Pour  $l=1$ , on a des roses polaires à 2 pétales :

$$\begin{aligned} - Y_{1,-1}(\theta, \phi) &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\phi} \sin \theta \\ - Y_{1,0}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ - Y_{1,1}(\theta, \phi) &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\phi} \sin \theta \end{aligned}$$

## 6.6 Moment cinétique et rotations

Avec  $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ , la rotation autour de Oz d'un angle  $\alpha$  s'effectue par l'opérateur :

$$e^{-\frac{i\alpha}{\hbar} \hat{J}_z}$$

Pour la rotation d'une particule de spin 1/2 :

$$\left| j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2} \right\rangle_{\text{tourné de } \alpha} = e^{-\frac{i\alpha}{\hbar} \hat{J}_z} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = e^{-\frac{i\alpha}{2}} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

Si  $\alpha = 2\pi$ , alors  $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\text{tourné d'un tour}} = - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ . Le signe moins ne change que la phase : il n'est donc pas important tant que la particule reste seule, mais avec plusieurs particules cela peut conduire à des interférences.

Si  $\alpha = 4\pi$ , alors  $\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{\text{tourné de deux tours}} = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ . Il faut donc tourner la particule de deux tours pour revenir à son état initial.

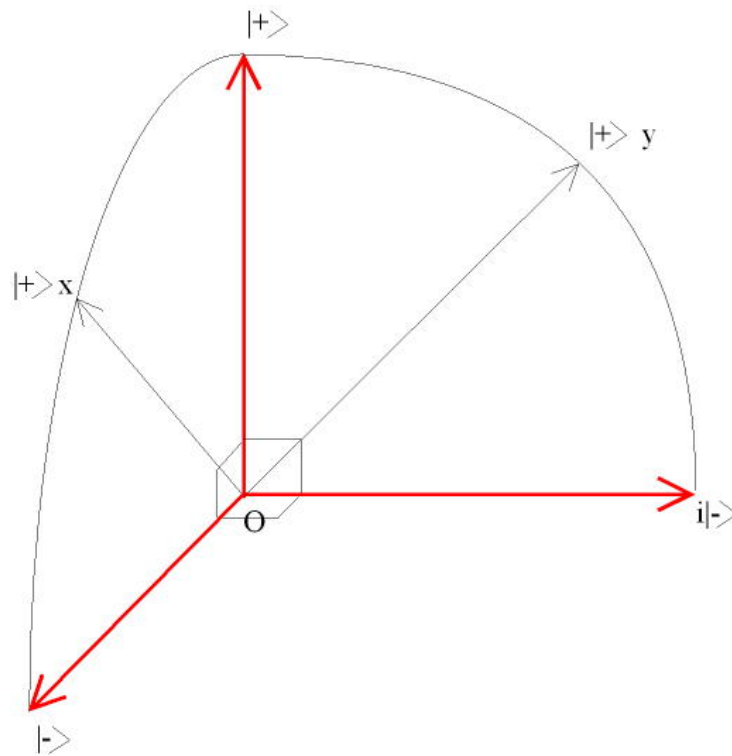


FIG. 6.1 – Dans l'espace réel dans lequel nous vivons, les angles entre les vecteurs représentés sont doubles :  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  s'opposent car ce sont des moments cinétiques opposés. Dans l'espace hermitien des spin, ils forment en revanche une base orthogonale de dimension 2. Sachant le rapport 2 qu'il y a entre cette représentation des angles et la réalité, on comprend pourquoi il faut opérer 2 tours sur une particule dans l'espace réel pour qu'elle retrouve son état de spin initial dans l'espace hermitien.

# Résolution approchée de l'équation de Schrödinger

On se place dans le cas où  $\hat{H}$  est indépendant du temps. L'équation de Schrödinger n'est soluble que dans de rares cas : puits carré, potentiel harmonique... Dans le cas général, il faut utiliser des méthodes numériques : la méthode variationnelle ou la méthode perturbative.

## 7.1 Méthode générale des perturbations stationnaires

On pose  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$ , avec  $\hat{H}_0$  la partie prépondérante de  $\hat{H}$  dont on connaît les solutions stationnaires analytiques :

$$\hat{H}_0 |n, i\rangle = E_n |n, i\rangle$$

$\hat{H}_1$  est "petit", assimilé à une perturbation. On fait alors un développement limité en puissance de  $\hat{H}_1$  : pour cela on pose  $\hat{H}_1 = \lambda \hat{H}'_1$  avec  $\lambda \ll 1$  et " $\hat{H}'_1 \approx \hat{H}_0$ " :

$$\begin{cases} |\psi\rangle &= |\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \lambda^2 |\psi_2\rangle + \dots \\ E &= E_{(0)} + \lambda E_{(1)} + \lambda^2 E_{(2)} + \dots \\ \hat{H} |\psi\rangle &= E |\psi\rangle \quad \text{avec } \hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'_1 \end{cases}$$

Ensuite, on identifie les puissances de  $\lambda$  dans les polynômes obtenus et on applique les conditions de normalisation :

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \Leftrightarrow \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle + \lambda (\langle \psi_0 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle) + \lambda^2 \dots = 1$$

En identifiant les coefficients du polynôme en  $\lambda$  :

$$\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1, \quad \langle \psi_0 | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | \psi_0 \rangle = 0, \dots$$

## 7.2 Niveau non perturbé non dégénéré

$$(\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}'_1)(|\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \lambda^2 |\psi_2\rangle + \dots) = (E_{(0)} + \lambda E_{(1)} + \lambda^2 E_{(2)} + \dots)(|\psi_0\rangle + \lambda |\psi_1\rangle + \lambda^2 |\psi_2\rangle + \dots)$$

A l'ordre 0 :

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 |\psi_0\rangle &= E_{(0)} |\psi_0\rangle \\ |\psi_0\rangle &= |n\rangle, \quad E_{(0)} = E_n\end{aligned}$$

### 7.2.1 Energie à l'ordre 1

On identifie les coefficients en  $\lambda^1$  :

$$\hat{H}_0 |\psi_1\rangle + \hat{H}'_1 |n\rangle = E_n |\psi_1\rangle + E_{(1)} |n\rangle$$

On multiplie chaque membre par  $\langle n|$  :

$$E_{(1)} = \langle n | \hat{H}'_1 | n \rangle$$

L'énergie à l'ordre 1 est donc :

$$E = E_n + \lambda \langle n | \hat{H}'_1 | n \rangle = E_n + \langle n | \hat{H}_1 | n \rangle$$

### 7.2.2 Vecteur propre à l'ordre 1

$$\hat{H}_0 |\psi_1\rangle + \hat{H}'_1 |n\rangle = E_n |\psi_1\rangle + E_{(1)} |n\rangle$$

On multiplie chaque membre par  $\langle n'|$  avec  $n' \neq n$  :

$$E'_n \langle n' | \psi_1 \rangle + \langle n' | \hat{H}'_1 | n \rangle = E_n \langle n' | \psi_1 \rangle \Leftrightarrow \langle n' | \psi_1 \rangle = \frac{\langle n' | \hat{H}'_1 | n \rangle}{E_n - E'_n}$$

Or  $\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| = \mathbf{1}$ , donc

$$|\psi_1\rangle = \sum_{n'} \langle n' | \psi_1 \rangle |n'\rangle = \langle n | \psi_1 \rangle |n\rangle + \sum_{n' \neq n} \langle n' | \psi_1 \rangle |n'\rangle$$

Avec la normalisation on a :

$$\langle n | \psi_1 \rangle + \langle \psi_1 | n \rangle = 0 = \text{Re}(\langle n | \psi_1 \rangle)$$

Si on impose à  $|\psi_1\rangle$  une phase de sorte que  $\langle n | \psi_1 \rangle \in \mathbb{R}$ , alors  $\langle n | \psi_1 \rangle = 0$

Le vecteur d'état à l'ordre 1 est donc :

$$|\psi\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n' | \hat{H}'_1 | n \rangle}{E_n - E'_n} |n'\rangle = |n\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle}{E_n - E'_n} |n'\rangle$$

On a une condition nécessaire de convergence avec  $\left| \langle n' | \hat{H}_1 | n \rangle \right| \ll |E_n - E'_n|$ .

### 7.2.3 Energie à l'ordre 2

On identifie les coefficients en  $\lambda^2$  :

$$\hat{H}_0 |\psi_2\rangle + \hat{H}'_1 |\psi_1\rangle = E_n |\psi_2\rangle + E_{(1)} |\psi_1\rangle + E_{(2)} |n\rangle$$

On multiplie chaque membre par  $\langle n|$  :

$$E_n \langle n|\psi_2\rangle + \langle n|\hat{H}'_1 |\psi_1\rangle = E_n \langle n|\psi_2\rangle + E_{(1)} \langle n|\psi_1\rangle + E_{(2)}$$

On a donc :

$$E_{(2)} = \langle n|\hat{H}'_1 |\psi_1\rangle = \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n|\hat{H}'_1 |n'\rangle \langle n'|\hat{H}'_1 |n\rangle}{E_n - E'_n}$$

L'énergie à l'ordre 2 est donc :

$$E = E_n + \langle n|\hat{H}_1 |n\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{|\langle n|\hat{H}'_1 |n'\rangle|^2}{E_n - E'_n}$$

## 7.3 Niveau non perturbé dégénéré

A l'ordre 0,  $\hat{H}_0 |\psi_0\rangle = E_n |\psi_0\rangle$ .  $|\psi_0\rangle$  est dans un sous-espace propre tel que :

$$|\psi_0\rangle = \sum_{i'} c_{i'} |n, i'\rangle$$

On s'intéresse à l'énergie à l'ordre 1 : on identifie donc les coefficients en  $\lambda^1$  :

$$\hat{H}_0 |\psi_1\rangle + \hat{H}'_1 |n\rangle = E_n |\psi_1\rangle + E_{(1)} |n\rangle$$

On multiplie chaque membre par  $\langle n, i|$  :

$$\sum_{i'} \langle n, i|\hat{H}'_1 |n, i'\rangle c_{i'} = E_{(1)} c_i$$

$\hat{H}'_1$  est donc restreint au sous-espace propre de  $|\psi_0\rangle$ . Ainsi pour toutes les valeurs de  $i$  on a le système :

$$\begin{pmatrix} \vdots & & \\ \cdots & \langle n, i|\hat{H}'_1 |n, i'\rangle & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c'_i \\ \vdots \end{pmatrix} = E_{(1)} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c'_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Donc  $E_{(1)}$  est une valeur propre de  $\hat{H}'_1|_n$ . Il reste à diagonaliser la perturbation  $\hat{H}'_1|_n$  dans le sous-espace propre de  $|\psi_0\rangle = |n\rangle$  :  $E_{(1)}$  a alors plusieurs valeurs possibles, chacune associée à un  $|\psi_0\rangle$ .

## 7.4 Méthode des variations

### 7.4.1 Propriétés de l'état fondamental

Soit  $E_0$  l'énergie de l'état fondamental,  $|\phi_0\rangle$  le vecteur d'onde associé et on pose  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle$ . Alors :

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \sum_{n'n} c_n^* c_{n'} \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_{n'} \rangle \\ &= \sum_n |c_n|^2 E_n \\ &\geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \end{aligned}$$

Donc  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}$ ,  $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0$

### 7.4.2 Principe de la méthode

On commence par rechercher une classe de fonctions d'essai  $|\phi(\lambda)\rangle$  dont on subodore qu'elles peuvent être solution de notre problème, avec  $\lambda$  un ou plusieurs paramètres ajustable(s). Il faut alors minimiser  $E(\lambda) = \langle \phi(\lambda) | \hat{H} | \phi(\lambda) \rangle$ , et on espère que  $\min_\lambda E(\lambda) \approx E_0$ .

### 7.4.3 Exemple

Appliquons cette méthode au potentiel harmonique, en essayant la fonction d'onde  $\phi_\lambda(x) = \frac{1}{\lambda^2 + x^2}$ . On a alors :

$$\begin{aligned} E(\lambda) &= \frac{\langle \phi_\lambda | \hat{H} | \phi_\lambda \rangle}{\langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle} = \frac{\hbar^2}{4m\lambda^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\lambda^2 \\ \min E(\lambda) &= \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \geq E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2} \end{aligned}$$

On a donc une bonne approximation de l'énergie mais une mauvaise approximation sur la fonction d'onde du fondamental (lorentzienne au lieu d'une gaussienne mais a priori si on utilise cette méthode c'est qu'on ignore la solution analytique).



## Systemes à deux particules

Les propriétés spécifiquement quantique que nous avons abordées sont :

- l'aspect ondulatoire  $\Rightarrow$  le principe de superposition
- l'aspect particulaire  $\Rightarrow$  les probabilités
- la dualité onde/corpuscule  $\Rightarrow$  principe d'incertitude

Nous allons ici découvrir une nouvelle propriété propre à la mécanique quantique : la corrélation quantique.

### 8.1 Produit tensoriel d'espaces de Hilbert

#### 8.1.1 Exemple simple

Soit deux particules ponctuelles :

- particule 1 :  $\psi(\vec{r}_1, t)$
- particule 2 :  $\psi'(\vec{r}_2, t)$

L'ensemble des deux particules va alors être décrit par une fonction d'onde  $\psi''(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$  tel que  $|\psi''(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)|^2$  est la densité de probabilité de trouver la particule 1 en  $\vec{r}_1$  **ET** la particule 2 en  $\vec{r}_2$ . Rappelons que dans le cas classique de l'électromagnétisme, lorsqu'on combine deux ondes électromagnétiques, on obtient une onde somme décrite par seulement 3 variables spatiales. Ici, on en a 6.

#### 8.1.2 Notion générale de produit tensoriel

La particule 1 seule est décrite par  $|\psi_1\rangle \in \mathcal{E}_1$  de dimension  $d_1$  et de base  $\{|u_i\rangle\}_{i \in [[1, d_1]]}$ .

La particule 2 seule est décrite par  $|\psi_2\rangle \in \mathcal{E}_2$  de dimension  $d_2$  et de base  $\{|v_j\rangle\}_{j \in [[1, d_2]]}$ .

L'ensemble des deux particule 1 et 2 est décrit par  $|\psi\rangle \in \mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  de dimension  $d_1 \times d_2$  et de base  $\{|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle\}_{i, j \in [[1, d_1]] \times [[1, d_2]]}$ . On pose  $|u_i\rangle \otimes |v_j\rangle = |u_i, v_j\rangle$

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{E}, |\psi\rangle = \sum_{i, j} |u_i\rangle \otimes |v_j\rangle$$

$$\langle u_i, v_j | u_{i'}, v_{j'} \rangle = \langle u_i | u_{i'} \rangle v_j v_{j'} = \delta_{i' i} \delta_{j' j}$$

$$\langle \psi | \psi' \rangle = \sum_{i,j} \lambda_{ij}^* \lambda_{ij}'$$

Soit  $\hat{A}_1$  un opérateur agissant sur la particule 1 (matrice  $d_1 \times d_1$ ) et  $\hat{B}_2$  un opérateur agissant sur la particule 2 (matrice  $d_2 \times d_2$ ). Alors  $\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2$  est un opérateur agissant sur  $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  :

$$\begin{aligned} (\hat{A}_1 \otimes \hat{B}_2) |u_i, v_j\rangle &= (\hat{A}_1 |u_i\rangle) \otimes (\hat{B}_2 |v_j\rangle) \\ &= \left( \sum_{i'} \langle u_{i'} | \hat{A}_1 |u_i\rangle |u_{i'}\rangle \right) \otimes \left( \sum_{j'} \langle v_{j'} | \hat{B}_2 |v_j\rangle |v_{j'}\rangle \right) \\ &= \sum_{i',j'} \langle u_{i'} | \hat{A}_1 |u_i\rangle \langle v_{j'} | \hat{B}_2 |v_j\rangle |u_{i'}, v_{j'}\rangle \end{aligned}$$

Cas particulier de l'opérateur ne s'appliquant qu'à une de deux particules :

$$" \hat{A}_1 " = \hat{A}_1 \otimes \mathbf{1}_2$$

$$" \hat{B}_2 " = \mathbf{1}_1 \otimes \hat{B}_2$$

$$[ " \hat{A}_1 " , " \hat{B}_2 " ] = 0$$

Dans la suite de l'exposé, on identifiera " $\hat{A}_1$ " à  $\hat{A}_1$ .

### 8.1.3 Etat factorisé, état intriqué

Un état  $|\psi\rangle$  est factorisable s'il existe  $|\psi_1\rangle \in \mathcal{E}_1$  et  $|\psi_2\rangle \in \mathcal{E}_2$  tel que :

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \Leftrightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi(\vec{r}_1, t) \times \psi(\vec{r}_2, t)$$

Ces états factorisés forment un espace de dimension  $d_1 + d_2$  dans  $\mathcal{E}$  qui lui est de dimension  $d_1 \times d_2$ . Ainsi, il existe des états  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$  non factorisables appelés états intriqués.

#### Mesures sur $|\psi\rangle$

On pose  $\hat{A}_1 |u_i\rangle = a_i |u_i\rangle$  et  $\hat{B}_2 |v_j\rangle = b_j |v_j\rangle$ . Alors :

- $a_i$  est valeur propre de  $\hat{A}_1 \otimes \mathbf{1}_2$  de vecteur propre associé  $|u_i\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  pour toutes fonctions d'onde  $|\psi_2\rangle \in \mathcal{E}_2$

$$\hat{A}_1 |u_i\rangle \otimes |\psi_2\rangle = a_i |u_i\rangle \otimes |\psi_2\rangle$$

- $b_j$  est valeur propre de  $\mathbf{1}_1 \otimes \hat{B}_2$  de vecteur propre associé  $|\psi_1\rangle \otimes |v_j\rangle$  pour toutes fonctions d'onde  $|\psi_1\rangle \in \mathcal{E}_1$

**Mesures sur un état factorisé**

Soit un état factorisé  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ . La probabilité de mesurer successivement  $(a_{i_0}, b_{j_0})$  est :

$$P_{|\psi\rangle}(a_{i_0}, b_{j_0}) = \left\| \hat{Q}_{j_0} \hat{P}_{i_0} |\psi\rangle \right\|^2 \text{ avec } \hat{P}_{i_0} = |u_{i_0}\rangle \langle u_{i_0}| \otimes \mathbf{1}_2, \hat{Q}_{j_0} = \mathbf{1}_1 \otimes |v_{j_0}\rangle \langle v_{j_0}|$$

$$\begin{aligned} P_{|\psi\rangle}(a_{i_0}, b_{j_0}) &= \left\| \hat{Q}_{j_0} \hat{P}_{i_0} |\psi\rangle \right\|^2 \\ &= \left\| \langle u_{i_0} | \psi_1 \rangle |u_{i_0}\rangle \otimes |v_{j_0}\rangle \langle v_{j_0} | \psi_2 \rangle \right\|^2 \\ &= |\langle u_{i_0} | \psi_1 \rangle|^2 |\langle v_{j_0} | \psi_2 \rangle|^2 \end{aligned}$$

On obtient le produit des probabilités : les deux mesures ne sont pas corrélées. Après la mesure de  $\hat{A}_1$ , l'état  $|\psi\rangle$  devient  $|u_i\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  : la réduction du paquet d'onde ne concerne que la particule 1. Après la mesure de  $\hat{B}_2$ , l'état devient  $|u_{i_0}\rangle \otimes |v_{j_0}\rangle$ .

**Mesures sur un état non factorisé**

Soit un état factorisé  $|\psi\rangle = \sum_{i,j} \lambda_{ij} |u_i, v_j\rangle$  :

$$\hat{P}_{i_0} |\psi\rangle = \sum_j \lambda_{i_0 j} |u_{i_0}, v_j\rangle = |u_{i_0}\rangle \otimes \sum_j \lambda_{i_0 j} |v_j\rangle$$

L'état devient factorisé et l'état de la particule 2 dépend de ce qui a été mesuré sur la particule 1 !

**8.1.4 Fonction de corrélation  $C_{AB}$** 

$$C_{AB} = \langle \hat{A}_1 \hat{B}_2 \rangle - \langle \hat{A}_1 \rangle \langle \hat{B}_2 \rangle = \left\langle \left( \hat{A}_1 - \langle \hat{A}_1 \rangle \right) \left( \hat{B}_2 - \langle \hat{B}_2 \rangle \right) \right\rangle = \langle \delta \hat{A}_1 \delta \hat{B}_2 \rangle$$

Pour un état factorisé  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$  :

$$\langle \psi_1 | \otimes \langle \psi_2 | \hat{A}_1 \hat{B}_2 | \psi_1 \rangle \otimes | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A}_1 | \psi_1 \rangle \langle \psi_2 | \hat{B}_2 | \psi_2 \rangle \Rightarrow C_{AB} = 0$$

Pour un état intriqué  $|\psi\rangle = \sum_{ij} \lambda_{ij} |u_i v_j\rangle$ , avec  $\hat{A}_1 |u_i\rangle = a_i |u_i\rangle$  et  $\hat{B}_2 |v_j\rangle = b_j |v_j\rangle$  :

$$\langle \hat{A}_1 \hat{B}_2 \rangle = \sum_{ij} a_i b_j |\lambda_{ij}|^2$$

Ainsi a priori on a  $C_{AB} \neq 0$  pour un état intriqué.

Cherchons à quantifier  $C_{AB}$  : d'après la relation d'Heisenberg généralisée, on a :

$$\Delta^2 A \Delta^2 B \geq \frac{1}{4} \left| \langle [\hat{A}_1, \hat{B}_2] \rangle \right|^2 + C_{AB}^2 = C_{AB}^2$$

$$\Leftrightarrow |C_{AB}| \leq \Delta A \Delta B$$

De plus on a  $|C_{AB}| = \delta A \delta B$  si  $\delta A$  et  $\delta B$  sont proportionnels.

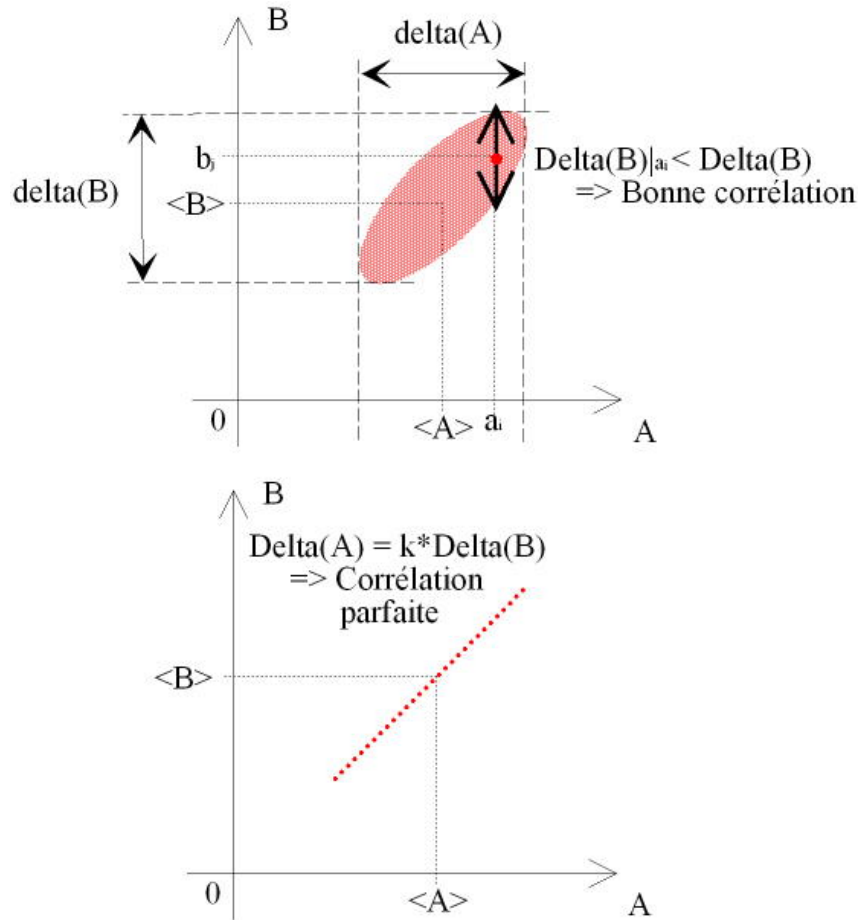


FIG. 8.1 – Exemples de corrélations

### 8.1.5 Théorème de non-clonage

Supposons que l'on puisse créer un appareil capable de cloner une fonction d'onde  $|\psi\rangle$  en deux fonctions d'ondes identiques  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_1$  et  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_2$ . Ainsi on aurait :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{appareil}} |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$$

$$|\phi\rangle \xrightarrow{\text{appareil}} |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle$$

Cet appareil étant quantique, il est linéaire donc :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle + |\phi\rangle) &\xrightarrow{\text{clonage}} \frac{1}{2} (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \otimes (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle + |\phi\rangle) &\xrightarrow{\text{linéarité}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle + |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{2} (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \otimes (|\psi\rangle + |\phi\rangle) \neq \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle + |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle)$$

Il n'est donc pas possible de cloner un état  $|\psi\rangle$  car sinon on a violation de la linéarité et on pourrait mesurer précisément la position sur un clone et précisément l'impulsion sur un état clone ce qui violerait l'inégalité d'Heisenberg.

### 8.1.6 Autre exemple de produit tensoriel

Pour une particule à spin :

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\text{position}} \otimes \mathcal{E}_{\text{spin}} = \{|x, y, z\rangle \otimes |j, m_j\rangle\}$$

Ainsi  $\langle j, m_j, x, y, z | \psi \rangle = \psi_{j, m_j}(x, y, z)$

## 8.2 Deux particules de spin 1/2

### 8.2.1 Position du problème

Soit deux particules de spin 1/2 :

- particule 1 de vecteur d'état  $|s_1, m_1\rangle \in \mathcal{E}_1$
- particule 2 de vecteur d'état  $|s_2, m_2\rangle \in \mathcal{E}_2$

Ainsi  $\mathcal{E}_1 \in \mathcal{E}_2 = \{|s_1, m_1, s_2, m_2\rangle\}$ . Or  $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$  et  $m_1 = m_2 = \pm \frac{1}{2}$ .

Donc  $|s_1, m_1, s_2, m_2\rangle = |m_1, m_2\rangle$  est :

- état propre de  $\hat{S}_1^2$  et de  $\hat{S}_2^2$  avec pour valeur propre associée  $\frac{3}{4}\hbar^2$
- état propre de  $\hat{S}_{1z}$  avec pour valeur propre associée  $m_1\hbar$
- état propre de  $\hat{S}_{2z}$  avec pour valeur propre associée  $m_2\hbar$

### 8.2.2 Moment cinétique total

$$\hat{S} = \vec{S}_1 \otimes \mathbf{1}_2 + \mathbf{1}_1 \otimes \vec{S}_2 = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \in \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

$\hat{S}$  est un moment cinétique car  $[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z$ .

Donc il existe des vecteurs  $|s, m\rangle$  vecteurs propres de  $\hat{S}^2$  de valeur propre associée  $s(s+1)\hbar^2$  et de  $\hat{S}_z$  de valeur propre associée  $m\hbar$ .

$$\hat{S} = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2(\hat{S}_{1x}\hat{S}_{2x} + \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y} + \hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z}) \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{S}^2 & \hat{S}_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{S}^2 & \hat{S}_2^2 \end{bmatrix} = 0$$

$$\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} \Rightarrow \begin{bmatrix} \hat{S}_z & \hat{S}_1^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{S}_z & \hat{S}_2^2 \end{bmatrix} = 0$$

$\{\hat{S}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_z\}$  est un ensemble d'observables qui commutent. Il existe donc une base commune  $\{|s, s_1, s_2, m\rangle\}$  de vecteurs propres communs à ces observables.

### 8.2.3 Relation entre les bases

$$\{|m_1, m_2\rangle\} \overset{?}{\leftrightarrow} \{|s, m\rangle\}$$

Avec  $\hat{S}_z |m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar |m_1, m_2\rangle$ , on en déduit la matrice diagonale dans la base  $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$  :

$$\hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Avec la relation  $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ , on obtient :

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+}$$

Puis on en déduit la matrice de  $\hat{S}^2$  (non diagonale) dans la base  $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$  :

$$\hat{S}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \left| m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \right\rangle &= |s = 1, m = 1\rangle = \text{'' } \uparrow\uparrow \text{''} \\ \left| m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle &= |s = 1, m = -1\rangle = \text{'' } \downarrow\downarrow \text{''} \end{aligned}$$

On diagonalise la matrice 2x2 centrale : on trouve deux valeurs propres 2 et 0. Comme les valeurs propres de  $\hat{S}^2$  sont de la forme  $s(s+1)\hbar^2$  :

- pour 0,  $s=0$  d'où le vecteur propre associé  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) = |s = 0, m = 0\rangle$
- pour 2,  $s=1$  d'où le vecteur propre associé  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) = |s = 1, m = 0\rangle$

D'où les états propres de  $\hat{S}^2$  et  $\hat{S}_z$  :

- $|s = 1, m = -1\rangle = |--\rangle$
- $|s = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle)$
- $|s = 1, m = 1\rangle = |++\rangle$
- $|s = 0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$

Les 3 premiers vecteurs sont appelés états triplets et le dernier état singulet.

### 8.2.4 Etat singulet

L'état singulet est un état intriqué. En effet la probabilité de trouver l'état :

- $\left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$  est  $\frac{1}{2}$
- $\left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle$  est  $\frac{1}{2}$
- $\left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle$  est 0
- $\left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$  est 0

Par conséquent  $\Delta S_{1z} = \Delta S_{2z} = \frac{\hbar}{2}$  et :

$$C_{S_{1z}S_{2z}} = \frac{1}{2} \left(-\frac{\hbar^2}{4}\right) + \frac{1}{2} \left(-\frac{\hbar^2}{4}\right) = -\frac{\hbar^2}{4} = -\Delta S_{1z} \Delta S_{2z}$$

On a corrélation parfaite! L'anticorrélation entre  $S_{1z}, S_{2z}$  se généralise à  $S_{1x}, S_{2x}$  et  $S_{1y}, S_{2y}$ .

De plus pour l'opérateur rotation :

$$e^{i\frac{\theta\hat{S}_z}{\hbar}} |s = 0, m = 0\rangle = |s = 0, m = 0\rangle$$

L'état  $|s = 0, m = 0\rangle$  est donc invariant par rotation donc sphérique.

On peut montrer que  $\langle \hat{S}_1 \cdot \vec{a} \hat{S}_2 \cdot \vec{b} \rangle = -\vec{a} \cdot \vec{b} \Delta \hat{S}_1 \Delta \hat{S}_2 = \gamma_{\vec{a}\vec{b}} \Delta \hat{S}_1 \Delta \hat{S}_2$  avec  $\vec{a}, \vec{b}$  des vecteurs quelconques unitaires.

## 8.3 Vous avez dit corrélations quantiques ?

### 8.3.1 Corrélation quantique

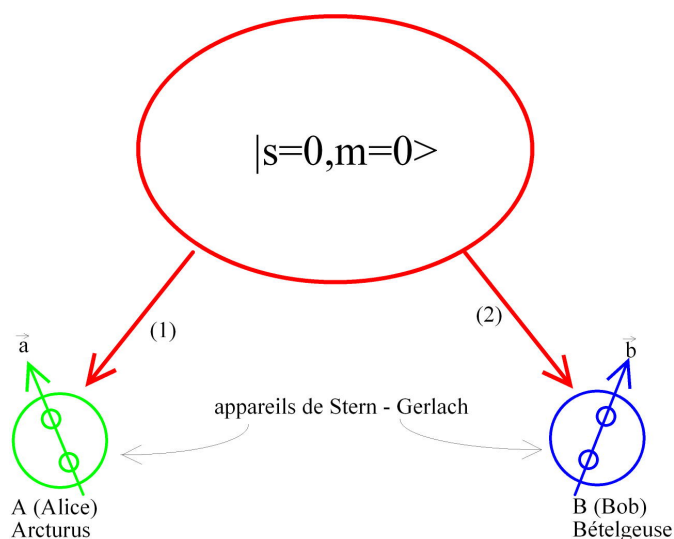


FIG. 8.2 – Sachant qu'on part d'un état parfaitement corrélé, si Bob mesure un spin  $+1/2$  pour la particule 2, alors il est certain qu'Alice mesurera un spin  $-1/2$  et vice versa. Il y a comme un effondrement instantané du paquet d'onde malgré la distance pour les deux particules simultanément.

### 8.3.2 Corrélation classique

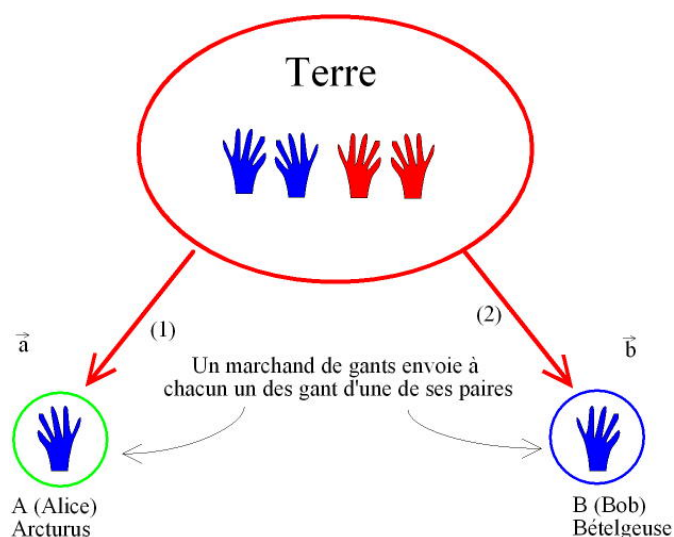


FIG. 8.3 – Si Bob reçoit un gant gauche bleu, alors il sait instantanément qu'ALice recevra un gant droit bleu et vice versa : il y a une corrélation parfaite là aussi



### 8.3.3 Paradoxe Einstein-Podolsky-Rosen (1935) et inégalités de Bell (1964)

Einstein, Podolsky et Rosen ont mis en évidence un paradoxe de la mécanique quantique en 1935 qui peut s'illustrer par l'exemple suivant. Si, pour un état singulet donc parfaitement corrélé, la mesure de  $\hat{S}_{1x}$  donne une incertitude nulle sur  $\hat{S}_{2x}$  et si de même la mesure de  $\hat{S}_{1y}$  donne une incertitude nulle sur  $\hat{S}_{2y}$ , alors  $\Delta\hat{S}_{2x}\Delta\hat{S}_{2y} = 0$ . Or  $[\hat{S}_{2x}, \hat{S}_{2y}] \neq 0$  donc d'après l'inégalité d'Heisenberg  $\Delta\hat{S}_{2x}\Delta\hat{S}_{2y} \geq k\hbar > 0$  : on a une violation apparente de cette propriété fondamentale de la mécanique quantique (celle qui permet d'expliquer les interférences de particules pour les trous d'Young...). Einstein, Podolsky et Rosen suggèrent que la mécanique quantique n'est pas complète dans sa description de la réalité et qu'il existe des variables cachées qui pourraient résoudre ce problème. Ces variables pourraient être, dans un cas classique, la connaissance de tous les paramètres nécessaires pour savoir si une pièce va tomber du côté pile ou du côté face ou le numéro de série de la paire de gants envoyée (ce qui permettrait de savoir leur couleur sans ouvrir la boîte).

Bell publie en 1964 un article qui suppose l'existence de ces variables cachées et démontre des contraintes fortes imposées à la mécanique quantique utilisant ces variables. Posons  $\lambda$  cette variable, alors

$$\langle \hat{A}_1 \hat{B}_2 \rangle = \int d\lambda p(\lambda) A_1(\lambda) B_2(\lambda)$$

Or a priori en mécanique quantique "normale" :

$$|B| = |\gamma_{\vec{a}'\vec{b}'} + \gamma_{\vec{a}\vec{b}} + \gamma_{\vec{a}'\vec{b}} - \gamma_{\vec{a}\vec{b}'}| \leq 4$$

Avec les variables cachées, Bell montre que :

$$|B| \leq 2$$

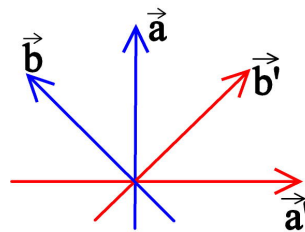


FIG. 8.4 – Configuration simple pour trouver des conditions sur les inégalités de Bell

Par un calcul de mécanique quantique, dans la configuration ci-dessus, on trouverait :

$$|B| = 4 \times \frac{1}{\sqrt{2}} = 2\sqrt{2} > 2$$

Par des expériences sur des photons, Alain Aspect parvient à mesurer en 1980  $|B| \approx 2\sqrt{2}$  avec une incertitude suffisamment faible pour que l'hypothèse des variables cachées soit rejetée.