Mécanique quantique — L3

Harold Erbin

Notes de cours de Magistère L3 donné par M. Lafarge.

Version : 27 avril 2011
Site : http://harold.e.free.fr/

Sommaire

Première partie

Concepts fondamentaux

Chapitre 1

Introduction

1.1 Préambule

La description habituelle part de la physique classique pour, progressivement, passer à la physique quantique (problème du corps noir...).

La mécanique quantique a commencé à être développée vers 1920. Le développement du formalisme a été achevé vers 1926. L'invention de la mécanique quantique est dû au fait que la physique classique [1] ne permettait pas d'expliquer le comportement de la matière au niveau microscopique, par exemple :

- la conductivité des matériaux ;
- la stabilité et la physique des atomes.

1.2 Expériences et effets précurseurs

- Rayonnement du corps noir : émission d'un rayonnement électromagnétique par un corps en équilibre à température constante.
  Planck expliqua correctement le phénomène, en 1900, avec la loi qui porte son nom.
- Spectres atomiques discrets : présence de raies correspondant à des valeurs d'énergie particulières pour lesquelles les atomes peuvent absorber ou émettre de la lumière.

1.3 Quantitication et constante de Planck

Dans toutes ces expériences, on observe le caractère discret des énergies mises en jeu. L'origine du mot "quantique" vient d'ailleurs de cette particularité : il vient de "quantum", qui désigne une unité discrète, une quantité bien définie.

Il a été nécessaire d'introduire une nouvelle constante fondamentale : la *constante de Planck*, notée h, avec

$$h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J s} \tag{1.1}$$

1. La physique classique englobe : la mécanique classique, la thermodynamique et l'électromagnétisme.

On utilise aussi beaucoup la *constante de Planck réduite*

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \approx 1.05 \times 10^{-34}\ \mathrm{J\ s} \tag{1.2}$$

h correspond au rapport entre l'énergie d'un rayonnement électromagnétique et de sa fréquence, ce qui nous donne

$$E = h\nu = \hbar\omega \tag{1.3}$$

h est donc la constante fondamentale des phénomènes quantiques. Elle est très petite, ce qui entraine des difficultés pour observer les phénomènes quantiques (cet ordre de grandeur correspond à l'échelle des atomes).

1.3.1 Analyse dimensionnelle

$$\begin{aligned} [\hbar] &= ML^2T^{-2} \times T \\ &= ML^2T^{-1} \\ &= \underbrace{L}_{\text{longueur}} \times \underbrace{MLT^{-1}}_{\text{quantité de mouvement}} \end{aligned}$$

ce qui correspond aux dimensions d'un moment cinétique. Nous verrons que $\hbar$ est un quantum de moment cinétique.

1.4 Aujourd'hui

Toute la compréhension du comportement de la matière des noyaux aux solides est basée sur la mécanique quantique. De plus, de nouveau phénomènes spécifiquement quantiques se sont développés, par exemple :

– résonance magnétique nucléiare (RMN) : excitation du spin des atomes ;
– la physique des semiconducteurs ;
– les lasers (light amplification by stimulated emission of radiation).

Remarque : En mécanique quantique, il existe très peu de problèmes dont l'on peut trouver la solution exacte.

Chapitre 2

L'expérience Stern et Gerlach

2.1 Description

Cette expérience a été réalisée à Frankfort en 1922 par O. Stern et W. Gerlach.

Le principe de cette expérience est de mesurer le moment magnétique d'atomes individuels en leur faisant traverser un champ magnétique non uniforme (figure 2.1).

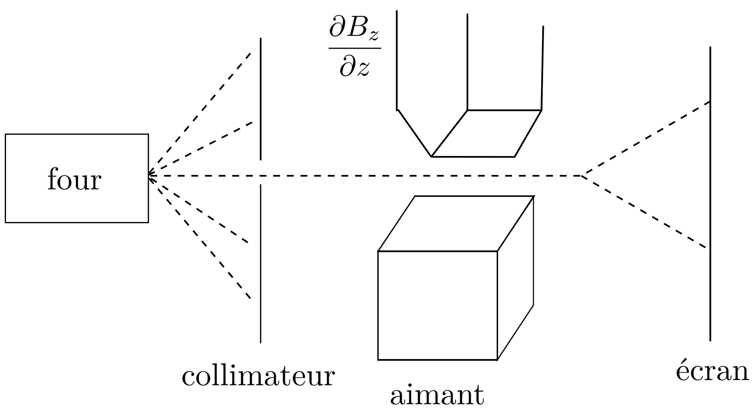

FIGURE 2.1 – Montage de l'expérience de Stern et Gerlach.

Résultat : le moment magnétique est quantifié, cela signifie qu'il ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs.

Des atomes d'argent sont émis par le four avec une vitesse parallèle à l'axe y. L'aimant crée un gradient de champ $\partial B_z/\partial t < 0$.

L'argent est un élément électriquement neutre, paramagnétique : chaque atome se comporte comme un petit aimant permanent. Le magnétisme de la matière est dû au moment des particules chargées. Le moment magnétique $\vec{\mu}$ est créé par le mouvement de ces dernières.

$\vec{\mu}$ interagit avec $\vec{B}$, ce qui produit une énergie potentielle de $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ et, si $\vec{B}$ n'est pas uniforme, l'atome subit donc une force

$$\vec{F} = \nabla(\vec{\mu}\cdot\vec{B}) \tag{2.1}$$

avec

$$F_z \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \tag{2.2}$$

Cette force dévie la trajectoire des atomes. Elle est fixée par l'appareil, donc la déviation ne dépend que de μ_z (puisque le champ extérieur est connu).

Cette expérience consiste à mesurer la composant selon z du moment magnétique, à partir du point d'impact. À la sortie du four, il n'y a pas d'orientation privilégiée pour $\vec{\mu}$: ainsi, selon la mécanique classique, μ_z peut prendre n'importe quelle valeur entre $-\|\vec{\mu}\|$ et $\|\vec{\mu}\|$: on devrait donc observer une tâche homogène sur l'écran.

2.2 Résultats

Dans les faits, deux tâches apparaissent sur l'écran, donc μ_z ne peut prendre que deux valeurs, $\pm\mu_B$, où μ_B est le *magnéton de Bohr*, et qui vaut

$$\mu_B = \pm\frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27\times 10^{-24}\ \mathrm{J\ T^{-1}} \tag{2.3}$$

où e est la charge de l'électron et m_e sa masse.

On sait maintenant que le moment $\vec{\mu}$ de l'argent est dû à un électron parmi les quarante-sept électrons de l'atome, relié au moment cinétique intrinsèque de l'électron (dit de spin).

On note $\vec{S}$ le moment cinétique de spin (intrinsèque) et on a la relation

$$\vec{\mu} = \gamma\vec{S} \tag{2.4}$$

où γ est le facteur gyromagnétique. Pour un électron, on a

$$\gamma = \frac{-e}{m_e} \tag{2.5}$$

d'où

$$S = \pm\frac{\hbar}{2} \tag{2.6}$$

Cette expérience montre que le moment magnétique de l'électron et la composante selon z du spin sont quantifiés [1]. Ce dernier peut prendre deux valeurs :

$$S = \pm\frac{\hbar}{2} \tag{2.7}$$

Remarque : Ici il n'y a aucun effet particulier associé à l'axe z : si nous renversions l'appareil, on obtiendrait les mêmes résultats avec la composante x (par exemple). La quantification ne dépend pas de l'axe considéré.

1. On parle de "spin up" et de "spin down".

2.3 Séquences d'appareil de Stern et Gerlach

Le faisceau traverse plusieurs appareils en série.

2.3.1 Configuration 1

Deux Stern et Gerlach selon z en série (figure 2.2).

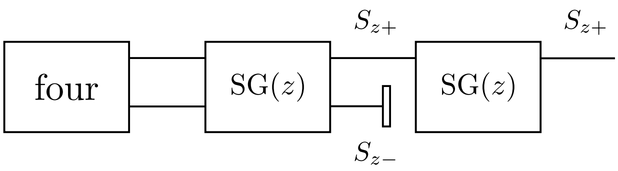

FIGURE 2.2 – Expérience de Stern et Gerlach — Configuration 1.

À la sortie du deuxième appareil, un seul faisceau émerge.
Conclusion : le premier appareil prépare les atomes dans un état bien défini.

2.3.2 Configuration 2

Deux Stern et Gerlach en série, selon z puis x (figure 2.3).

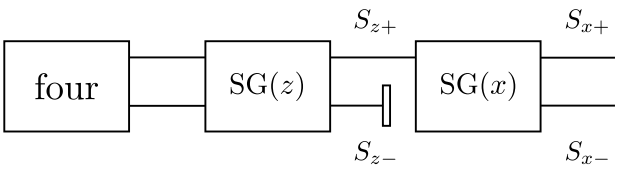

FIGURE 2.3 – Expérience de Stern et Gerlach — Configuration 2.

À la sortie du second appareil, nous obtenons deux faisceaux d'intensité égale. Nous avons donc une probabilité égale de mesurer $\pm\hbar/2$ pour S_x.
Conclusion : À la sortie du deuxième appareil, deux faisceaux émergent, dont les états sont $S_{z+}S_{x+}$ et $S_{z+}S_{x-}$.

2.3.3 Configuration 3

Trois Stern et Gerlach en série, selon z puis x et enfin z (figure 2.4).

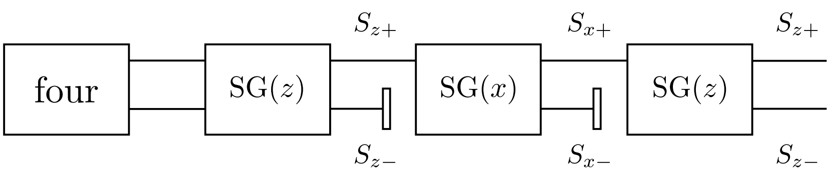

FIGURE 2.4 – Expérience de Stern et Gerlach — Configuration 3.

Cette configuration contredit l'hypothèse émise à la fin de l'expérience précédente. $\vec{\mu}$ et $\vec{S}$ ont ici un comportement complètement quantique ce qui nous oblie à abandonner toute intuition classique.

Les atomes sortant du premier appareil possèdent un $\vec{\mu}$ quantifié selon la direction z et l'état S_{z+} est bien défini. On le note $|+\rangle$ [2]. De même les atomes du second faisceau sont dans l'état $|-\rangle$. À la sortie du deuxième appareil, $\vec{\mu}$ est quantifié selon x : les deux faisceaux sont respectivement dans les états $|+\rangle_x$ et $|-\rangle_x$.

Dans le dernier appareil entre l'état $|+\rangle_x$ et les faisceaux sortant sont dans les états $|-\rangle$ et $|+\rangle$. Il y a donc une relation entre $|+\rangle_x$ et $|-\rangle$ et $|+\rangle$. Quelle est-elle ? Il s'agit d'une relation vectorielle, qui est

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \tag{2.8}$$

Ces vecteurs appartiennent à l'espace dit des "états". Il s'agit d'un espace vectoriel de dimension 2. $|+\rangle_x$ est une combinaison linéaire des vecteurs $|+\rangle$ et $|-\rangle$. En mécanique quantique, on parle de superposition.

L'égalité des intensités à la sortie du troisième appareil est liée aux coefficients égaux dans la superposition. Si on injecte dans l'état $|+\rangle_x$ après SG z, la probabilité d'avoir $|+\rangle$ est $\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$. De même pour $|-\rangle$.

On a aussi

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \tag{2.9}$$

Si l'on avait un Stern et Gerlach y, comment peut-on les écrire une superposition en fonction de $|+\rangle$ et $|-\rangle$ avec des coefficients égaux en valeur absolue ? On peut utiliser les nombres complexes.

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle \tag{2.10a}$$

$$|-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle \tag{2.10b}$$

2. Notation de Dirac d'un état.

Chapitre 3

Kets, bras et opérateurs

3.1 Espaces des états

En mécanique quantique, un état physique est représenté par un vecteur d'état dans un espace vectoriel complexe.

Définition 3.1 (Notation de Dirac)**.** Pour un vecteur d'état, on note $|\cdot\rangle$. On parle de *ket*.

Définition 3.2 (Espace des états)**.** L'*espace des états* est un espace vectoriel complexe abstrait, qui contient les vecteurs d'état.

Sa dimension dépend du problème physique considéré.

Exemple 3.1.

1. $\vec{\mu}$ de l'électron : dimension 2.
2. Mouvement d'une particule : dimension infinie (il s'agit d'un espace de Hilbert).

$|\psi\rangle$ contient toute l'information sur le système physique : tout ce que l'on peut mesurer s'obtient à partir de l'expression de $|\psi\rangle$.

Exemple 3.2.

À la sortie du Stern et Gerlach x, on a

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

Proposition 3.1. Soient $|\psi\rangle$ et $|\phi\rangle$ deux états, alors on a les propriétés suivantes :

– Additivité :

$$|\psi\rangle + |\phi\rangle = |\chi\rangle \tag{3.1}$$

qui est lui aussi un état.

– Commutativité de la multiplication par un scalaire $c \in \mathbb{C}$

$$c\,|\psi\rangle = |\psi\rangle\, c \tag{3.2}$$

– Le vecteur nul est 0 et non $|0\rangle$ est tel que

$$|\psi\rangle + 0 = |\psi\rangle \tag{3.3}$$

Définition 3.3 (Opérateur)**.** Un *opérateur* transforme un ket $|\psi\rangle$ en un autre ket $|\phi\rangle$.

L'action d'un opérateur A sur un ket $|\psi\rangle$ s'écrit $A\,|\psi\rangle$:

$$A\,|\psi\rangle = |\phi\rangle \tag{3.4}$$

En mécanique quantique, les grandeurs physiques sont représentées par des opérateurs. Il existe une séparation entre le système et les grandeurs physiques. Comment faire le lien entre un état $|\psi\rangle$ et une grandeur physique A ? Il faut écrire le vecteur $|\psi\rangle$ dans une base dont chaque état correspond à une valeur définie de la grandeur A.

Définition 3.4 (État propre)**.** Soit un opérateur A,alors l'état $|\psi_n\rangle$ est un *état propre* de A si

$$A\,|\psi_n\rangle = a_n\,|\psi_n\rangle \tag{3.5}$$

où a_n est une valeur propre de A.

L'ensemble des valeurs propres d'un opérateur s'appelle le spectre de A.

Exemple 3.3.

Soit l'opérateur S_z associé à la composante selon z du moment cinétique du spin. Les deux états propres sont $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Les valeurs propres associées sont $\pm\hbar/2$, car

$$S_z\,|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\,|\pm\rangle$$

3.2 Produit scalaire et bras

L'espace des états est muni d'un produit scalaire complexe : on le note $\langle\,\psi|\,\varphi\rangle$, où $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ sont deux kets.

Proposition 3.2. Soient $|\psi\rangle$ et $|\varphi\rangle$ deux états, alors

1. $$\langle\,\psi|\,\varphi\rangle = \langle\,\varphi|\,\psi\rangle^* \tag{3.6}$$
   donc il n'est pas commutatif.
2. $\langle\,\psi|\,\varphi\rangle$ est linéaire par rapport à φ.
3. Le produit scalaire est défini positif
   $$\langle\,\psi|\,\psi\rangle \geq 0 \tag{3.7}$$
4. $$\langle\,\psi|\,\psi\rangle = 0 \Longrightarrow |\psi\rangle = 0 \tag{3.8}$$

Deux états sont orthogonaux si leur produit scalaire est nul.

Définition 3.5 (Bra)**.** À chaque ket $|\psi\rangle$ de l'espace des états est associé un élément $\langle\psi|$, appelé bra, de l'espace dual.

Définition 3.6 (Bracket)**.** Le produit scalaire $\langle\,\psi|\,\varphi\rangle$ est un bra $\langle\psi|$ agissant agissant sur un ket $|\varphi\rangle$. Le symbole $\langle\,\cdot|\,\cdot\rangle$ est appelé un bracket (c'est à dire un crochet).

Proposition 3.3. Le bra associé au ket $|\varphi\rangle = \lambda\,|\varphi_1\rangle + \mu\,|\varphi_2\rangle$ est $|\varphi\rangle = \lambda^*\langle\varphi_1| + \mu^*\langle\varphi_2|$.

Le produit scalaire est donc antilinéaire par rapport au membre de gauche.

Démonstration.

Soit le ket $|\varphi\rangle = \lambda\,|\varphi_1\rangle + \mu\,|\varphi_2\rangle$, alors l'action du bra associé sur un ket $ket\psi$ est

$$\begin{aligned}\langle\,\varphi|\,\psi\rangle &= \langle\,\psi|\,\varphi\rangle^* \\ &= \langle\,\psi|\,\lambda\varphi_1 + \mu\varphi_2\rangle^* \\ &= (\lambda\,\langle\,\psi|\,\varphi_1\rangle + \mu\,\langle\,\psi|\,\varphi_2\rangle)^* \\ &= \lambda^*\,\langle\,\psi|\,\varphi_1\rangle^* + \mu^*\,\langle\,\psi|\,\varphi_2\rangle^* \\ &= \lambda^*\,\langle\,\varphi_1|\,\psi\rangle + \mu^*\,\langle\,\varphi_2|\,\psi\rangle \\ &= \langle\,\lambda^*\varphi_1 + \mu^*\varphi_2|\,\psi\rangle\end{aligned}$$

□

Définition 3.7 (Norme)**.** On définit la norme du ket $|\psi\rangle$ par

$$\||\psi\rangle\| = \sqrt{\langle\,\psi|\,\psi\rangle} \tag{3.9}$$

Définition 3.8 (Vecteur normé)**.** Un vecteur est dit normé si

$$\langle\,\psi|\,\psi\rangle = 1 \tag{3.10}$$

En général, on utilise des vecteurs normés.

3.3 Opérateurs

Proposition 3.4. Soient A, B et C trois opérateurs, alors on a les propriétés suivantes :

1. $$A\,|\psi\rangle = B\,|\psi\rangle \qquad \forall\,|\psi\rangle \Longrightarrow A = B \tag{3.11}$$
2. $$A\,|\psi\rangle = 0 \qquad \forall\,|\psi\rangle \Longrightarrow A = 0 \tag{3.12}$$
3. L'addition de deux opérateurs est commutative et associative :
$$A + B = B + A \tag{3.13}$$
$$A + (B + C) = (A + B) + C \tag{3.14}$$
4. Les opérateurs sont linéaires :
$$A\Big(\lambda\,|\varphi_1\rangle + \mu\,|\varphi_2\rangle\Big) = \lambda A\,|\varphi_1\rangle + \mu A\,|\varphi_2\rangle \tag{3.15}$$

Un opérateur agit de droite à gauche sur les bras, et de gauche à droite sur les kets. L'action de A sur un bra $\langle\varphi|$ est notée $\langle\varphi|A$.

La relation qui définit $\langle\varphi|A$ est

$$\langle\varphi|(A\,|\psi\rangle) = (\langle\varphi|A)\,|\psi\rangle = \langle\varphi|A\,|\psi\rangle \tag{3.16}$$

Notation de Dirac : écriture compacte qui contient les mathématiques des espaces de Hilbert.

Définition 3.9 (Élément de matrice)**.** $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ est l'élément de matrice de A entre $\langle\varphi|$ et $|\psi\rangle$.

Définition 3.10 (Opérateur adjoint)**.** Le bra associé à $A|\psi\rangle$ est $\langle\psi|A^\dagger$, où $A^\dagger$ est l'opérateur adjoint de A.

Le produit scalaire de $|\varphi\rangle$ et $A^\dagger|\psi\rangle$ est égal au produit scalaire de $|\psi\rangle$ et $A|\varphi\rangle$.

En règle générale, le dual de $A|\psi\rangle$ est différent de $\langle\psi|A$.

Produit d'opérateurs :

$$\begin{aligned} AB|\psi\rangle &= A(B|\psi\rangle) \\ &= A|\psi'\rangle \end{aligned}$$

En général, $AB \neq BA$.

Définition 3.11. Le commutateur de deux opérateurs est

$$[A, B] = AB - BA \tag{3.17}$$

Si $[A, B] = 0$, alors A et B commutent.

Définition 3.12. L'anticommutateur de deux opérateurs est

$$\{A, B\} = AB + BA \tag{3.18}$$

Proposition 3.5.

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \tag{3.19}$$

On a

$$\begin{aligned} AB|\psi\rangle &\xrightarrow{\text{dual}} \langle\psi|(AB)^\dagger \\ &= (\langle\psi|B^\dagger)A^\dagger \\ &= \langle\psi|B^\dagger A^\dagger \end{aligned}$$

Pour tout $|\psi\rangle$, on a

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle$$

Définition 3.13. Un opérateur est auto-adjoint (ou hermitien) si

$$A = A^\dagger \tag{3.20}$$

Pour un opérateur hermitien, on a donc

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\varphi\rangle$$

Soit un ket $|\varphi\rangle$ et un bra $\langle\psi|$, alors $|\varphi\rangle\langle\psi|$ est un opérateur. On prend $|\chi\rangle$

$$\Big(|\varphi\rangle\langle\psi|\Big)|\chi\rangle = \langle\,\psi|\,\chi\rangle\,|\varphi\rangle$$

On a

$$\Big(|\varphi\rangle\langle\psi|\Big)^\dagger = |\psi\rangle\langle\varphi|$$

Exemple 3.4.

Soit $|+\rangle$ et $|-\rangle$, alors

$$\begin{aligned} |+\rangle\langle-|\;|-\rangle &= |+\rangle\underbrace{\langle\,-|\,-\rangle}_{=1} \\ &= |+\rangle \end{aligned}$$

3.3.1 Exemples d'opérateurs

- S_x, S_y et S_z sont les opérateurs associés aux composantes du moment cinétique de spin. Opérateur de dimension 2.
- $\overrightarrow{S} = \overrightarrow{S_1} + \overrightarrow{S_2}$ est le spin total de deux particules de spin 1. Opérateur de dimension 4.
- H est l'opérateur hamiltonien associé à l'énergie.
- L'opérateur position associé à $\hat{x}$.
- L'opérateur impulsion associé à $\hat{p}$.

Tous les opérateurs qui précèdent sont "mesurables", donc hermitiens, mais il en existe qui ne sont pas hermitiens :

- $|+\rangle \langle-| = S_+$.
- Les opérateurs de création et d'annihilation $a^\dagger$ et a pour un oscillateur, où

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{i}{m\omega} p \right) \tag{3.21}$$

Chapitre 4

Bases de l'espace des états et représentation matricielle

4.1 États propres d'un opérateur hermitien

Dans tout ce paragraphe, A sera hermitien, et $|\psi_n\rangle$ un état propre de A.

Définition 4.1 (Vecteur propre)**.** On a

$$A\,|\psi_n\rangle = a_n\,|\psi_n\rangle \tag{4.1}$$

Proposition 4.1. Les valeurs propres a_n sont réelles.

Démonstration.
On a les propriétés

$$a_n\,|\psi_n\rangle \xrightarrow{\text{dual}} a_n^*\langle\psi_n| = \langle\psi_n|A^\dagger = \langle\psi_n|A$$

et

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|A\,|\psi_n\rangle &= \langle\psi_n|(a_n\,|\psi_n\rangle) = a_n\,\langle\,\psi_n|\,\psi_n\rangle\\ &= (\langle\psi_n|a_n)\,|\psi_n\rangle = a_n^*\,\langle\,\psi_n|\,\psi_n\rangle\end{aligned}$$

d'où

$$a_n = a_n^* \tag{4.2}$$

donc a_n est réel. □

Proposition 4.2 (Orthogonalité des vecteurs propres)**.** Deux vecteurs propres associés à des valeurs propres différentes sont orthogonaux pour un opérateur hermitien. Si on normalise les états propres $|\psi_n\rangle$ de A, on a

$$\langle\,\psi_p|\,\psi_n\rangle = \delta_{pn} \tag{4.3}$$

Les vecteurs propres d'un opérateur hermitien forment une base de l'espace des états.

Démonstration.

Soient deux états propres $|\psi_p\rangle$ et $|\psi_n\rangle$ auxquels correspondent deux valeurs propres a_n et a_p. On suppose $a_n \neq a_p$, alors

$$\begin{gathered}\langle\psi_p|A = a_p^*\langle\psi_p| = a_p\,|\psi_p\rangle \\ A\,|\psi_n\rangle = a_n\,|\psi_n\rangle \\ \langle\psi_p|A\,|\psi_n\rangle = a_p\,\langle\,\psi_p|\,\psi_n\rangle = a_n\,\langle\,\psi_p|\,\psi_n\rangle \\ (a_p - a_n)\,\langle\,\psi_p|\,\psi_n\rangle = 0 \\ \Longrightarrow \langle\,\psi_p|\,\psi_n\rangle = 0\end{gathered}$$

□

Définition 4.2 (Décomposition d'un ket)**.** Tout état $|\psi\rangle$ peut s'écrire sous la forme d'une combinaison linéaire des vecteurs propres, c'est à dire

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n\,|\psi_n\rangle \tag{4.4}$$

Exemple 4.1 (Spin 1/2)**.**

Pour un spin 1/2

$$|\psi\rangle = c_+\,|+\rangle + c_-\,|-\rangle$$

avec $c_+, c_- \in \mathbb{C}$.

On obtient les coefficients c_k de la décomposition par

$$\begin{aligned}\langle\,\psi_k|\,\psi\rangle &= \sum_n c_n\,\langle\,\psi_k|\,\psi_n\rangle \\ &= \sum_n c_n\delta_{kn} \\ &= c_k\end{aligned}$$

et on peut écrire

$$\begin{gathered}|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle}_{\in\mathbb{C}}|\psi_n\rangle = \underbrace{\sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\psi_n|}_{\text{opérateur}}\,|\psi\rangle \\ |\psi\rangle = I\,|\psi\rangle\end{gathered}$$

Définition 4.3 (Relation de fermeture)**.** On définit la relation de fermeture par

$$I = \sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\psi_n| \tag{4.5}$$

et on appelle I opérateur identité.

Exemple 4.2 (Relation entre les produits scalaires et les coefficients)**.**

$$\begin{aligned}\langle\,\psi|\,\psi\rangle &= \langle\psi|\sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle \\ &= \sum_n \langle\,\psi|\,\psi_n\rangle\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle = \sum_n \langle\,\psi_n|\,\psi\rangle^*\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle \\ &= \sum_n |\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle|^2 = \sum_n |c_n|^2\end{aligned}$$

Exemple 4.3.
Soient $\psi = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ et $\varphi = \sum_n d_n |\varphi_n\rangle$, alors

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | \psi \rangle &= \langle\varphi| \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi \rangle \\
&= \sum_n \langle \varphi | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \psi \rangle \\
&= \sum_n d_n^* c_n
\end{aligned}$$

Un vecteur est normé si $\sum_n |c_n|^2 = 1$.

Définition 4.4. L'opérateur $|\psi_n\rangle \langle\psi_n|$ est appelé projecteur associé à l'état $|\psi_n\rangle$, c'est à dire

$$|\psi\rangle |\psi_n\rangle \langle\psi_n| = c_n |\psi_n\rangle \tag{4.6}$$

Il sélectionne dans $|\psi\rangle$ le terme en $|\psi_n\rangle$.

Exemple 4.4 (Spin 1/2)**.**
Spin 1/2 :

$$I = |+\rangle \langle+| + |-\rangle \langle-|$$

4.1.1 Représentation matricielle

Le produit scalaire $\langle \varphi | \psi \rangle$ peut s'écrire

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | \psi \rangle &= \sum_n d_n^* c_n \\
&= \begin{pmatrix} d_1^* & \cdots & d_1^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

On note aussi

$$\langle\varphi| = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \varphi \rangle^* & \cdots & \langle \psi_n | \varphi \rangle^* \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

le bra $\langle\varphi|$ et

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle \psi_n | \psi \rangle \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

le ket $|\psi\rangle$.

Soit un opérateur A, alors

$$\begin{aligned}
A &= \sum_m \sum_n |\psi_m\rangle \underbrace{\langle\psi_m| A |\psi_n\rangle}_{\in\mathbb{C}} \langle\psi_n| \\
&= \sum_{m,n} \langle\psi_m| A |\psi_n\rangle |\psi_m\rangle \langle\psi_n|
\end{aligned}$$

Dans un espace de Hilbert de dimension N, il y a N^2 éléments de matrice de la forme $\langle\psi_m| A |\psi_n\rangle$. La matrice est de taille $n \times m$ (m indice de ligne et n indice de colonne).

On note

$$A_{mn} = \langle\psi_m| A |\psi_n\rangle \tag{4.9}$$

et on a, dans la base des $|\psi_n\rangle$

$$A = \begin{pmatrix} \langle\psi_1| A |\psi_1\rangle & \langle\psi_1| A |\psi_2\rangle & \cdots \\ \langle\psi_2| A |\psi_1\rangle & \ddots & \\ \vdots & & \langle\psi_m| A |\psi_n\rangle \end{pmatrix}$$

On a

$$\langle\psi_m| A |\psi_n\rangle = \langle\psi_n| A^\dagger |\psi_m\rangle^*$$

d'où

$$A_{mn} = (A^\dagger_{nm})^* \tag{4.10}$$

Pour un opérateur hermitien, on obtient

$$A^\dagger_{nm} = A_{nm} = A^*_{mn} \tag{4.11}$$

L'opérateur $C = AB$ est représenté dans la base $|\psi_n\rangle$ par le produit de la matrice représentant A et de celle représentant B.

Exemple 4.5.

$$|\varphi\rangle = A|\psi\rangle = \sum_n d_n |\psi_n\rangle$$

Les composantes de $|\varphi\rangle$ sur la base des $|\psi_n\rangle$ sont

$$\begin{aligned} d_n &= \langle\,\psi_n|\,\varphi\rangle = \langle\psi_n| A |\psi\rangle \\ &= \sum_m \langle\psi_n| A |\psi_m\rangle \langle\,\psi_m|\,\psi\rangle \\ &= \sum_m A_{nm} c_m \end{aligned}$$

Chapitre 5

Mesures et grandeurs physiques

5.1 Mesure en mécanique quantique

Comment faire le lien entre $|\psi\rangle$ et la valeur d'une grandeur physique à l'aide des opérateurs ?

Postulat 5.1. Pour ce faire, on pose plusieurs postulats :
- Toute grandeur physique A est associée à un opérateur hermitien, que l'on notera $\hat{A}$, et agissant dans l'espace de Hilbert des états.
- Les seuls résultats possibles d'une mesure de la grandeur A sont les valeurs propres de l'opérateur associé.
- La probabilité d'obtenir la valeur propre a_n de vecteur propre $|\psi\rangle_n$ est égale à $|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2$.

En écrivant cela, on fait l'hypothèse que les vecteurs propres sont normés et que les valeurs propres a_n ne sont pas dégénérées.

Définition 5.1 (Amplitude de probabilité)**.** On définit l'amplitude de probabilité c_n par

$$c_n = \langle \psi_n | \psi \rangle \tag{5.1}$$

Proposition 5.1. La somme des probabilités de tous les résultats possibles est

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{5.2}$$

Démonstration.

D'après (4.4), on déduit que la probabilité de mesure de a_n est

$$\begin{aligned}
|\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 &= \left| \langle \psi_n | \left\langle \sum_m c_m \middle| \psi_m \right\rangle \right|^2 \\
&= \left| \sum_m c_m \langle \psi_n | \psi_m \rangle \right|^2 \\
&= |c_n|^2
\end{aligned}$$

□

Remarques :

1. L'amplitude est un nombre complexe, au contraire de la probabilité.
2. La mesure est aléatoire. La loi de probabilité est bien définie (nombre réel positif).
3. La mesure individuelle ne donne pas toute l'information disponible : il est impossible de remonter aux lois statistiques.

On obtient donc la probabilité grâce à un très grand nombre de mesures sur des systèmes identiques (caractérisés par $|\psi\rangle$).

Si $|\psi\rangle = |\psi_n\rangle$ alors la mesure de A donne a_n avec une probabilité 1. $|\psi_n\rangle$ est un état avec une valeur de A bien définie (repensez à l'expérience du Stern et Gerlach).

Le plus souvent, la mesure est destructrice.

Définition 5.2 (Mesure projective)**.** Une mesure idéale est une mesure projective. C'est à dire que si la mesure de A donne la valeur propre a_n immédiatement après la mesure, le système est dans l'état ψ_n associé à a_n.

Remarque : On appelle parfois cette loi la loi de réduction du paquet d'ondes. C'est une manière de préparer un état quantique bien déterminé.

5.1.1 Cas de valeurs propres dégénérées

Supposons qu'il existe plusieurs $|\psi_n\rangle$ tels que $A\,|\psi_n\rangle = a_n\,|\psi_n\rangle$. On les note $|\psi_{n,i}\rangle$, avec $i \in [\![1, g(n)]\!]$, où $g(n)$ est l'ordre de dégénérescence. Alors

$$|\psi\rangle = \sum_n \left(\sum_i^{g(n)} c_{n,i}\,|\psi_{n,i}\rangle \right)$$

et la probabilité de mesurer a_n est

$$\sum_{i=1}^{g(n)} |c_{n,i}|^2 = \sum_{i=1}^{g(n)} \Big|\,\langle\, \psi_{n,i}|\,\psi\rangle\,\Big|^2 \tag{5.3}$$

Proposition 5.2 (Valeur moyenne)**.** La valeur moyenne de A dans l'état $|\psi_n\rangle$ est donnée par par

$$\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A\,|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 a_n \tag{5.4}$$

Démonstration.

$$\begin{aligned}
\langle A\rangle_\psi &= \langle\psi|A\,|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|A\sum_n |\psi_n\rangle\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle = \langle\psi|\sum_n A\,|\psi_n\rangle\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\sum_n a_n\,|\psi_n\rangle\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle = \sum_n a_n\,\langle\,\psi|\,\psi_n\rangle\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle \\
&= \sum_n a_n\Big|\,\langle\,\psi_n|\,\psi\rangle\,\Big|^2 = \sum_n |c_n|^2 a_n
\end{aligned}$$

Il s'agit de la somme des valeurs possibles pondérées par leur probabilité. □

5.2 Superposition

Soient A et B deux grandeurs physiques avec $|\psi_n\rangle$ un état propre de A et $|\chi_n\rangle$ un état propre de B. Soit $|\psi\rangle$ un état du système.

- $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle$, mesure de B : b_n probabilité $\Big|\langle\,\chi_n|\,\psi_1\rangle\Big|^2$.
- $|\psi\rangle = |\psi_2\rangle$, mesure de B : b_n probabilité $\Big|\langle\,\chi_n|\,\psi_2\rangle\Big|^2$.

Alors si $|\psi\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$, avec $|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1$.

Mesure de B : b_n probabilité

$$\begin{aligned}
\Big|\langle\,\chi_n|\,\psi\rangle\Big|^2 &= \Big|\langle\,\chi_n|\,\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\rangle\Big|^2 \\
&= \Big|\lambda_1\langle\,\chi_n|\,\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\,\chi_n|\,\psi_2\rangle\Big|^2 \\
&= \Big(\lambda_1\langle\,\chi_n|\,\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\,\chi_n|\,\psi_2\rangle\Big)\Big(\lambda_1^*\langle\,\psi_1|\,\chi_n\rangle + \lambda_2^*\langle\,\psi_2|\,\chi_n\rangle\Big) \\
&= |\lambda_1|^2\Big|\langle\,\chi_n|\,\psi_1\rangle\Big|^2 + |\lambda_2|^2\Big|\langle\,\chi_n|\,\psi_2\rangle\Big|^2 + \underbrace{2\Re\Big(\lambda_1\lambda_2^*\langle\,\chi_n|\,\psi_1\rangle\langle\,\psi_2|\,\chi_n\rangle\Big)}_{\text{terme d'interférences quantiques}}
\end{aligned}$$

Les phases λ_1 et λ_2^* comptent. On somme toujours les amplitudes et jamais les probabilités.

5.3 Grandeurs compatibles

Définition 5.3. Soient A et B deux grandeurs, alors si

- $[A, B] = 0$, elles sont compatibles.
- $[A, B] \neq 0$, elles sont incompatibles.

Proposition 5.3. Les vecteurs propres de deux grandeurs compatibles sont communs.

$$AB|\psi_n\rangle = BA|\psi_n\rangle = a_n B|\psi_n\rangle$$

donc $B|\psi_n\rangle$ est un état propre de A de valeur propre $a_n \to B|\psi_n\rangle \propto |\psi_n\rangle$, donc $|\psi_n\rangle$ est un état propre de B.

Si a_n est dégénérée, $B|\psi_n\rangle$ appartient au sous-espace $\mathcal{E}_{a_n}$ des états propres de A de valeurs a_n.

Dans $\mathcal{E}_{a_n}$, il existe une base d'états propres de B, aussi états propres de A. On peut construire une base de l'espace de Hilbert constituée d'états propres communs à A et B. Si la base est unique : A et B est un ensemble complet d'observables qui commutent. Parfois il faut $\{A, B, C, \ldots\}$ opérateurs.

Exemple 5.1.

- spin 1/2 : S_z ou S_y ou S_x
- oscillateur harmonique 1D : H (hamiltonien)
- états atomiques : H, L^2, L_z, S_z

5.3.1 Mesure de grandeurs compatibles

Si on mesure $A \to B \to A$, la mesure de B ne perturbe pas la mesure de A.

Dans le cas de grandeurs compatibles, les propriétés statistiques des mesures sont indépendantes. Il est possible de mesurer A et B.

5.4 Inégalités de Heisenberg

On a $[A, B] \neq 0$. Les états propres de A sont différents de ceux de B. Il n'est pas possible de mesurer simultanément A et B.

Définition 5.4. On définit la fluctuation d'une grandeur A, notée ΔA, par

$$\Delta A^2 = \left\langle \left(A - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle = \left\langle A^2 \right\rangle - \langle A \rangle^2 \tag{5.5}$$

On montre la seconde forme par

$$\begin{aligned} \Delta A^2 &= \left\langle \left(A - \langle A \rangle \right)^2 \right\rangle \\ &= \left\langle A^2 - 2A \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \right\rangle \\ &= \left\langle A^2 \right\rangle - 2 \langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 \\ &= \left\langle A^2 \right\rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned}$$

Proposition 5.4 (Inégalités de Heisenberg)**.** Soient A et B deux grandeurs incompatibles, alors

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \langle [A, B] \rangle \right| \tag{5.6}$$

Démonstration.

Soit un état $|\psi\rangle$. On a

$$\Delta A^2 = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2$$

On notera

$$A - \langle A \rangle = \hat{A} - \langle A \rangle \, \mathrm{id}$$

On écrit $[A, B] = C$ et on définit

$$\begin{gathered} A' = \hat{A} - \langle A \rangle \, \mathrm{id} \\ B' = \hat{B} - \langle B \rangle \, \mathrm{id} \\ \langle \psi | A'^{\,2} | \psi \rangle = \Delta A^2 \\ \langle \psi | B'^{\,2} | \psi \rangle = \Delta B^2 \end{gathered}$$

On calcule la norme de $\langle \, A' + \lambda B' | \, \psi \rangle$ (avec $\lambda \in \mathbb{R}$)

$$\begin{aligned} \left| A' + \lambda B' \, |\psi\rangle \, \right|^2 &= \langle \psi | (A' + \lambda B')(A' + \lambda B') \, |\psi\rangle \\ &= \langle \psi | A'^{\,2} \, |\psi\rangle + \lambda^2 \langle \psi | B'^{\,2} \, |\psi\rangle + i\lambda \langle \psi | A'B' - B'A' \, |\psi\rangle \\ &= \Delta A^2 + \lambda^2 \Delta B^2 + i\lambda \, \langle [A', B'] \rangle_\psi \geq 0 \end{aligned}$$

A' et B' sont hermitiens, donc $i[A', B']$ est hermitien et $i\langle[A', B']\rangle$ est réel. On a $[A', B'] = [A, B]$.

C'est un binôme en λ, positif, donc le discriminant est négatif.

$$\langle[A', B']\rangle^2 - 4\Delta A^2 \Delta B^2 \leq 0$$
$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{\langle[A', B']\rangle^2}{4}$$

□

La forme la plus connue est celle reliant x, p :

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{5.7}$$

car $[x, p] = i\hbar$.

Exemple 5.2 (Oscillateur harmonique)**.**

On a
$$H = \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2 + \frac{p^2}{2m}$$
Soit $|\varphi_n\rangle$ un état propre de H, alors

$$H\,|\varphi_n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,|\varphi_n\rangle$$

Dans la base des $|\varphi_n\rangle$ on a

$$\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & & & \\ i & \ddots & -i\sqrt{2} & \ddots & & \\ 0 & i\sqrt{2} & \ddots & -i\sqrt{3} & & \\ & \ddots & i\sqrt{3} & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

qui est une matrice infinie. On a

$$\langle p\rangle_n = \langle\varphi_n| p\,|\varphi_n\rangle = 0$$

mais on peut montrer que

$$\langle\varphi_n| p^2\,|\varphi_n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) m\hbar\omega$$

Chapitre 6

Évolution temporelle

Quelle est l'évolution d'un ket $|\psi\rangle$ représentant un état physique avec le temps ? On note $|\psi(t)\rangle$ l'état $|\psi\rangle$ au temps t.

Postulat 6.1 (Équation de Schrödinger)**.**

$$\boxed{i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle} \tag{6.1}$$

avec $H = \hat{H}$ est l'opérateur hamiltonien associé à l'énergie du système.

Définition 6.1 (État stationnaire)**.** Un état stationnaire est un état propre de H, c'est à dire

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \tag{6.2}$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi_n(t)\rangle &= E_n |\psi_n(t)\rangle \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} |\psi_n(t)\rangle &= -\frac{iE_n}{\hbar} |\psi_n(t)\rangle \end{aligned}$$

On peut écrire $|\psi_n(t)\rangle$ dans une base d'états propres $|\varphi_n\rangle$ (4.4) et

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sum_k c_k(t) |\varphi_k\rangle &= \frac{-iE_n}{\hbar} \sum_k c_k(t) |\varphi_k\rangle \\ \implies \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} c_k(t) &= \frac{-iE_n}{\hbar} c_k(t) \end{aligned}$$

d'où

$$c_k(t) = c_k(0) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) \tag{6.3}$$

donc

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_k c_k(0) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |\varphi_k\rangle$$

$$|\psi_n(t)\rangle = \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |\psi_n(0)\rangle \tag{6.4}$$

L'état stationnaire à t est le même qu'à $t = 0$ avec un facteur de phase.
Soit $|\psi\rangle$ quelconque dans la base des $|\psi_n\rangle$, alors

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n(0)\rangle$$

d'où finalement

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n |\psi_n(t)\rangle = \sum_n c_n \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)|\psi_n(0)\rangle \tag{6.5}$$

Exemple 6.1.
Soient $|\psi\rangle_1, |\psi\rangle_2, |\psi\rangle_0$. On a

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|\psi_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|\psi_2\rangle$$
$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\exp\left(-i\frac{E_1 t}{\hbar}\right)|\psi_1\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}\exp\left(-i\frac{E_2 t}{\hbar}\right)|\psi_2\rangle$$

Remarques :

1. Le temps est un paramètre et non une grandeur physique que l'on mesure : aucun opérateur ne lui est associé.
2. Les valeurs moyennes d'une superposition peuvent varier dans le temps.

Chapitre 7

Produit tensoriel d'espaces d'états

Nécessaire : une particule à plusieurs degrés de liberté : position et spin, trois axes x, y et z. Plusieurs particules : deux spins 1/2.

Définition 7.1 (Degré de liberté)**.** Un degré de liberté est une grandeur physique nécessaire à la description du système.

Exemple 7.1.
Le spin est un degré de liberté.

Définition 7.2 (Produit tensoriel)**.** Soient $\mathcal{E}_A$ et $\mathcal{E}_B$ deux espaces de dimensions respectives N_A et N_B. On définit le produit tensoriel de $\mathcal{E}_A$ par $\mathcal{E}_B$ par

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_A \otimes \mathcal{E}_B \tag{7.1}$$

Soient $|\psi_A\rangle \in \mathcal{E}_A, |\psi_B\rangle \in \mathcal{E}_B$, alors on définit $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$ par

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle = |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle \tag{7.2}$$

Si $|u\rangle_i$ et $|v\rangle_j$ sont des bases respectivement de $\mathcal{E}_A$ et $\mathcal{E}_B$, alors $|u\rangle_i |v\rangle_j$ est une base de $\mathcal{E}$.

Exemple 7.2 (Deux spins 1/2)**.**
Soient $(|+\rangle_a, |-\rangle_a)$ et $(|+\rangle_b, |-\rangle_b)$. Alors une base de $\mathcal{E}$ est

$$(|+\rangle_a |+\rangle_b, |+\rangle_a |-\rangle_b, |-\rangle_a |+\rangle_b, |-\rangle_a |-\rangle_b)$$

Soient

$$|\psi_a\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \qquad |\psi_b\rangle = \sum_j d_j |v_j\rangle$$

alors

$$|\psi_a\rangle |\psi_b\rangle = \sum_{i,j} c_i d_j |u_i\rangle |v_j\rangle$$

Définition 7.3 (États intriqués)**.** Il existe des états de $\mathcal{E}$ du type $|\psi\rangle = \sum_{i,j} a_{i,j} |u_i\rangle |v_j\rangle$ qui ne peuvent s'écrire comme un produit $|\psi_a\rangle \otimes |\psi_b\rangle$. On parle d'états intriqués [1].

1. "Entangled" en anglais.

Exemple 7.3 (Deux spins 1/2)**.**

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle_a |-\rangle_b + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle_a |+\rangle_b$$

Proposition 7.1 (Produit tensoriel d'opérateurs)**.** Soient A dans $\mathcal{E}_A$ et B dans $\mathcal{E}_B$, alors

$$(A \otimes B) |\psi_A\rangle |\psi_B\rangle = (A |\psi_A\rangle) \otimes (B |\psi_B\rangle) \tag{7.3}$$

Exemple 7.4 (Deux spins 1/2)**.**

$$S_a \otimes S_b |\psi\rangle_a |\psi\rangle_b = S_a |\psi\rangle_a \otimes S_b |\psi\rangle_b$$

Proposition 7.2 (Prolongement d'opérateurs)**.** On prolonge les opérateurs $A \in \mathcal{E}_A$ et $B \in \mathcal{E}_B$ par

- $\tilde{A} = A \otimes \mathrm{id}_B$
- $\tilde{B} = \mathrm{id}_A \otimes B$

Proposition 7.3 (Produit scalaire)**.** Soient $|\psi_A\rangle |\psi_B\rangle$ et $|\psi'_A\rangle |\psi'_B\rangle$

$$\Big(|\psi_A\rangle |\psi_B\rangle \Big) \Big(|\psi'_A\rangle |\psi'_B\rangle \Big) = \langle \psi'_A | \psi_A\rangle \langle \psi'_B | \psi_B\rangle$$

Chapitre 8

Retour sur le spin 1/2

En dimension 2, on considère la base des états propres de S_z. Elle est notée $(\left|+\right\rangle, \left|-\right\rangle)$ avec

$$\left|+\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \left|-\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.1}$$

On écrit alors la matrice

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{8.2}$$

On veut trouver l'expression de l'état propre selon x noté $\left|+\right\rangle_x$. On a

$$\left|\left\langle + \middle| + \right\rangle_x\right|^2 = \frac{1}{2} \qquad \left|\left\langle - \middle| - \right\rangle_x\right|^2 = \frac{1}{2}$$

donc $\left|+\right\rangle_x = \alpha \left|+\right\rangle + \beta \left|-\right\rangle$ avec $|\alpha|^2 = |\beta|^2 = 1/2$.

$$\left|+\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left|+\right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{i\delta} \left|-\right\rangle$$

et ${}_x\left\langle + \middle| - \right\rangle_x = 0$ car $\left|-\right\rangle_x$ et $\left|+\right\rangle_x$ sont orthogonaux. Donc

$$\left|-\right\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left|+\right\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \mathrm{e}^{i\delta} \left|-\right\rangle$$

et donc

$$\begin{aligned} S_x &= \frac{\hbar}{2} \left|+\right\rangle_x {}_x\!\left\langle +\right| - \frac{\hbar}{2} \left|-\right\rangle_x {}_x\!\left\langle -\right| \\ &= \frac{\hbar}{2} \mathrm{e}^{-i\delta} \left|+\right\rangle \left\langle -\right| + \frac{\hbar}{2} \mathrm{e}^{i\delta} \left|-\right\rangle \left\langle +\right| \\ &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-i\delta} \\ \mathrm{e}^{i\delta} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

De meme pour

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{e}^{-i\gamma} \\ \mathrm{e}^{i\gamma} & 0 \end{pmatrix}$$

On a aussi les équations

$$\begin{gathered}
|_y \langle +|+\rangle_x|^2 = |_y \langle -|+\rangle_x|^2 = \frac{1}{2} \\
\iff \left|\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{i(\delta-\gamma)}\right| = \left|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\,\mathrm{e}^{i(\delta-\gamma)}\right| = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
\implies \delta - \gamma = \pm\frac{\pi}{2}
\end{gathered}$$

On choisit $\delta = 0$ et $\gamma = \pi/2$. D'où

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

S_x et S_y sont incompatibles :

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

Deuxième partie

Mécanique ondulatoire

Chapitre 9

Relations de commutation canonique

On s'intéresse à la description quantique du mouvement d'une particule.
On décrit le déplacement à une dimension selon un axe x.

- x : position ;
- $\hat{x}$: opérateur position ;
- $|x\rangle$: état propre de l'opérateur $\hat{x}$ de valeur propre x ;
- $\hat{p}$: opérateur impulsion.

Si les forces dérivent d'un potentiel, $\hat{p}$ est l'opérateur associé à mv.
$\hat{x}$ et $\hat{p}$ obéissent à

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \,\mathrm{id} \tag{9.1}$$

Définition 9.1 (Relation de commutation)**.**

$$\boxed{[x, p] = i\hbar} \tag{9.2}$$

On construit un opérateur $\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}$ avec $a \in \mathbb{R}$. On peut montrer que

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \,\mathrm{id} \longrightarrow [\hat{x}, \mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}] = -a\,\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}$$

$$\begin{aligned} \hat{x}\,\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar} &= \mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}\hat{x} - a\,\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar} \\ &= \mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}(\hat{x} - a\,\mathrm{id}) \end{aligned}$$

et l'action de $\hat{x}\,\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}$ sur $|x\rangle$ est

$$\begin{aligned} \hat{x}\,\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}\,|x\rangle &= \mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}(\hat{x} - a\,\mathrm{id})\,|x\rangle \\ &= \mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}(\hat{x}\,|x\rangle - a\,|x\rangle) \\ &= \mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}(x - a)\,|x\rangle \\ &= (x - a)\,\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}\,|x\rangle \end{aligned}$$

Ainsi $\mathrm{e}^{ia\hat{p}/\hbar}\,|x\rangle$ est un état propre de $\hat{x}$ de valeur propre $(x - a)$. $\hat{x}$ est un opérateur à spectre continu dans un espace de Hilbert de dimension infinie [1] :

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\,\langle x|\,\psi\rangle\,\mathrm{d}x \tag{9.3}$$

1. La somme discrète est remplacée par une intégrale.

$|+\rangle$ est donc une base indexée par un indice x continu.

La relation de fermeture est

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| \mathrm{d}x = \mathrm{id} \tag{9.4}$$

et la relation d'orthonormalisation devient

$$\langle x | x' \rangle = \delta(x - x') \tag{9.5}$$

Chapitre 10

Fonction d'onde

Définition 10.1 (Fonction d'onde)**.** On définit la fonction d'onde pour un état $|\psi\rangle$ par

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle \tag{10.1}$$

Il s'agit d'un nombre complexe. Il s'agit du coefficient de $|\psi\rangle$ dans la base $|x\rangle$. On l'appelle aussi fonction d'onde en représentation x.

$|x\rangle$ est un état de position bien défini et égale à x, tandis que $\psi(x)$ est une amplitude de probabilité :

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

est la probabilité (densité) de présence. $|\psi(x)|^2 \mathrm{d}x$ correspond à la probabilité de trouver la particule dans un intervalle $\mathrm{d}x$. On a donc

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \mathrm{d}x = 1 \tag{10.2}$$

si $\psi(x)$ est normée.

L'action de $\hat{x}$ sur $|\psi\rangle$ est $\hat{x}|\psi\rangle$. La fonction d'onde correspondante $\langle x|\hat{x}|\psi\rangle$ mais $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$ donc $\langle x|\hat{x} = \langle x|x$ et

$$\begin{aligned} \langle x|\hat{x}|\psi\rangle &= \langle x|x|\psi\rangle \\ &= x\langle x|\psi\rangle \\ &= x\psi(x) \end{aligned}$$

L'action de $\hat{x}$ sur $\psi(x)$ correspond à la multiplication par x.

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \varphi | x \rangle \langle x | \psi \rangle \,\mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x)^* \psi(x) \mathrm{d}x \end{aligned}$$

Cherchons l'action de $\hat{p}$. On a un opérateur

$$\mathrm{e}^{i\varepsilon\hat{p}/\hbar} = \mathrm{id} + i\frac{\varepsilon\hat{p}}{\hbar} + O(\varepsilon^2)$$

avec ε petit, donc

$$\mathrm{e}^{i\varepsilon\hat{p}/\hbar}\left|\psi\right\rangle = \left|\psi\right\rangle + i\frac{\varepsilon\hat{p}}{\hbar}\left|\psi\right\rangle + O(\varepsilon^2)$$

La fonction d'onde associée est

$$\begin{aligned}
&\langle x|\,\mathrm{e}^{i\varepsilon\hat{p}/\hbar}\left|\psi\right\rangle \\
&\qquad = \psi(x) + \frac{i\varepsilon}{\hbar}\langle x|\hat{p}\left|\psi\right\rangle + O(\varepsilon^2) \\
&\qquad = \left(\left\langle\, x\right|\,\mathrm{e}^{i\varepsilon\hat{p}/\hbar}\right\rangle\Big)\left|\psi\right\rangle \\
&\qquad = \langle\, x+\varepsilon|\,\psi\rangle \\
&\qquad = \psi(x+\varepsilon)
\end{aligned}$$

car

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-i\varepsilon\hat{p}/\hbar}\left|x\right\rangle &= \left|x+\varepsilon\right\rangle \\
\mathrm{e}^{i\varepsilon\hat{p}/\hbar}\left|x\right\rangle &= \left|x-\varepsilon\right\rangle \\
\langle x+\varepsilon| &= \langle x|\,\mathrm{e}^{i\varepsilon\hat{p}/\hbar}
\end{aligned}$$

donc

$$\langle x|\hat{p}\left|\psi\right\rangle = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\hbar}{i}\frac{\psi(x+\varepsilon)-\psi(x)}{\varepsilon}$$

ce qui donne

$$\langle x|\hat{p}\left|\psi\right\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} \tag{10.3}$$

Chapitre 11

Particule libre

Soit une particule de masse m dont l'énergie potentielle nulle. Le problème est à une dimension x. Son hamiltonien est donné par

$$H = \frac{p^2}{2m} \tag{11.1}$$

On cherche les états stationnaires (c'est à dire les états propres de H) :

$$\begin{aligned} H\psi(x) &= E\psi(x) \\ \frac{p^2}{2m}\psi &= E\psi \\ \frac{1}{2m}\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) &= E\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} &= E\psi \end{aligned}$$

On obtient l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{-2mE}{\hbar^2}\,\psi \tag{11.2}$$

On pose

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \tag{11.3}$$

ce qui donne

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0 \tag{11.4}$$

La solution de l'équation est

$$\psi_k(x) = c\,\mathrm{e}^{ikx}$$

On choisit généralement

$$c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Finalement, les fonctions propres du hamiltonien sont donc de la forme

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ikx} \tag{11.5}$$

Si on fait l'analogie avec la mécanique classique, ces fonctions correspondent à des ondes planes. k peut prendre toutes les valeurs comprises entre $-\infty$ et ∞ : il n'y a pas de quantification.

Calculons maintenant $\hat{p}\psi_k(x)$:

$$\begin{aligned}\hat{p}\psi_k(x) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ikx}\right)\\ &= \hbar k\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ikx}\\ &= \hbar k\psi_k(x)\end{aligned}$$

Ainsi, $\psi_k(x)$ est fonction propre de $\hat{p}$. Le vecteur propre associé est $\hbar k$.

On peut aussi écrire une autre formulation de ψ_k :

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{ipx/\hbar} \tag{11.6}$$

Il s'agit de la fonction d'onde associée à l'état $|p\rangle$.

Calculons aussi $\langle\,\psi_{k'}\,|\,\psi_k\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle\,\psi_{k'}\,|\,\psi_k\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-ik'x}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{d}x\\ &= \frac{1}{2\pi}\int\,\mathrm{e}^{i(k-k')x}\mathrm{d}x\end{aligned}$$

Si à $t = 0$ on a

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ikx}$$

alors

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ikx}\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} \tag{11.7}$$

car ψ est un état stationnaire et en utilisant l'énergie qui est donnée par

$$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{11.8}$$

et

$$\omega = \frac{E}{\hbar}$$

Pour une particule libre, la solution générale à (11.4) est donnée par une superposition d'ondes planes :

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\tilde{\psi}(p)\,\mathrm{e}^{i(px-Et)/\hbar}\mathrm{d}p \tag{11.9}$$

Si on représente une onde plane, elle correspond à une valeur bien définie de p. Si on calcule

$$|\psi_k(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} = cste$$

Cette probabilité est indépendante de x, donc même si l'impulsion est parfaitement définie, la particule est délocalisée. Ceci est dû aux inégalités de Heisenberg (5.6) :

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

$$\Delta p = 0 \Longrightarrow \Delta x \to \infty$$

Chapitre 12

Base des ondes planes

(11.5) est la base de l'espace des fonctions d'onde :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{ikx}$$

De fait, on a

$$\langle\, \psi_{k'} \,|\, \psi_k \rangle = \delta(k - k') \tag{12.1}$$

où δ est la distribution de Dirac. On a les propriétés suivantes :

$$\delta(x) = 0 \qquad x \neq 0 \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = f(0) \tag{12.2a}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0)\mathrm{d}x = f(x_0) \tag{12.2b}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{12.2c}$$

On a

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ikx}\mathrm{d}x$$

$$\delta(p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\mathrm{d}x$$

$$|\phi_k(x)|^2 = \frac{1}{2\pi} \longrightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\phi_k(x)|^2\mathrm{d}x \quad \text{diverge}$$

$\phi_k(x)$ ne représente pas un état physique car il n'appartient pas à l'espace de Hilbert, et de même pour $|k\rangle$ et $|p\rangle$.

Soit $\psi(x)$ un état stationnaire, et $\phi_p(x)$ une base continue, alors

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

Il s'agit de la transformée de Fourier de $\tilde{\psi}(p)$. De même, on a

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\,\mathrm{e}^{-ipx/\hbar}\mathrm{d}x = \mathrm{F}[\psi(x)]$$

Interprétation de $\tilde{\psi}(p)$:

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x$$

or

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$
$$\phi_p(x) = \langle x | p \rangle \Longrightarrow \phi_p^*(x) = \langle p | x \rangle$$

donc

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}(p) &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle p | x \rangle \langle x | \psi \rangle \, \mathrm{d}x \\ &= \langle p | \, \mathrm{id} \, | \psi \rangle = \langle p | \psi \rangle\end{aligned}$$

en introduisant la relation de fermeture (4.5). Ainsi $\tilde{\psi}(p)$ est la composante de l'état $|\psi\rangle$ dans la base continue $|p\rangle$ d'états propres de $\hat{p}$.

Quelque soit la base choisie, on a un même état $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned}|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \, |x\rangle \, \mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p) \, |p\rangle \, \mathrm{d}p\end{aligned}$$

Exemple 12.1.

La base des ondes planes permet d'étudier :

- les électrons dans les solides, les métaux et les semiconducteurs ;
- l'effet tunnel à travers une barrière ;
- les interférences quantiques.

Chapitre 13

Particules dans une boite

On considère un problème à une dimension : considérons un puit de potentiel infini ; cela signifie que

- $V(x) = 0$ si $0 \leq x \leq L$;
- $V(x) = \infty$ sinon.

La particule est confinée dans le puits.

Le hamiltonien entre 0 et L est

$$H = \frac{p^2}{2m} \tag{13.1}$$

On a de plus $\psi(x) = 0$ en dehors des puits. La continuité aux limites donne

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \tag{13.2}$$

On utilise l'équation de Schrödinger (6.2) :

$$H\psi = E\psi \Longrightarrow \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\psi \qquad 0 \leq x \leq L$$

avec

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Alors la solution générale est

$$\psi(x) = A\cos kx + B\sin kx \tag{13.3}$$

et les conditions aux limites donnent

$$\psi(0) = 0 \Longrightarrow A = 0$$
$$\psi(L) = B\sin(kL) = 0 \Longrightarrow kL = n\pi \qquad n \in \mathbb{N}$$

c'est à dire

$$k = \frac{n\pi}{L} \qquad n \in \mathbb{N} \tag{13.4}$$

d'où

$$\psi(x) = B\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \tag{13.5}$$

On détermine la constante B par la normalisation de ψ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \,\mathrm{d}x = \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \mathrm{d}x$$
$$= \frac{|B|^2 L}{2} = 1$$

d'où

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}} \tag{13.6}$$

Les fonctions d'onde des états stationnaires sont

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{13.7}$$

avec

$$E = E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} \tag{13.8}$$

Il y a une quantification de l'énergie et

$$E_n \propto n^2 \tag{13.9}$$

Les niveaux s'écartent si L diminue et se resserrent si L augmente (figure 13.1).

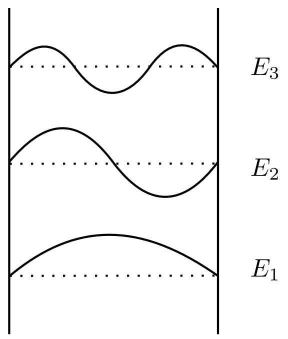

FIGURE 13.1 – Niveaux d'énergie pour une particule dans une boite.

Chapitre 14

Courant de probabilité

Soit $\psi(x,t)$, normé, à l'instant temps t. On a par définition

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

où la seconde équation est la densité de probabilité de présence en x au temps t.

Proposition 14.1. Il y a conservation de la probabilité :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 \,\mathrm{d}x = 1 \tag{14.1}$$

14.1 Forme locale de conservation

Définition 14.1. On définit la densité de probabilité $\rho(x,t)$ par

$$\boxed{\rho(x,t) = \psi(x,t)\psi^*(x,t)} \tag{14.2}$$

Définition 14.2. On définit le courant de probabilité $J(x,t)$ (ou densité de courant de probabilité) par

$$\boxed{J(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)} \tag{14.3}$$

Proposition 14.2. La forme locale de conservation de la probabilité est

$$\boxed{\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0} \tag{14.4}$$

Démonstration.
Soit $\rho(x,t) = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$, alors on peut écrire

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \frac{\partial\psi^*(x,t)}{\partial t}\psi(x,t) + \frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}\psi^*(x,t)$$

or l'équation de Schrödinger donne

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

En remplaçant, on trouve

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

On en déduit

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\psi^* - \psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right) = 0$$

qui peut se récrire

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\psi^* - \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) = 0$$

□

Exemple 14.1 (État stationnaire)**.**
Pour un état stationnaire :

$$\psi = \psi_0\,\mathrm{e}^{-iEr/\hbar}$$
$$|\psi(x,t)|^2 = |\psi(x,0)|^2 = cste$$
$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = 0 \Longrightarrow \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

Le courant de probabilité est indépendant de x.

Exemple 14.2 (Onde plane)**.**
Considérons une onde plane $\psi(x,t) = A\,\mathrm{e}^{ikx-iEt/\hbar}$, alors

$$J = \frac{\hbar}{2mi}(ik\,|A|^2 - (-ik)\,|A|^2) = \frac{\hbar k}{m}\,|A|^2$$

On a $p = \hbar k$ pour une onde plane, et $\hbar k/m = p/m$ est la vitesse de propagation de cette onde. On peut interpréter J comme un flux ininterrompu de particules.

La propagation se fait dans le sens des x positifs si $\psi_k(x) \propto \mathrm{e}^{ikx}$, et dans le sens des x négatifs si $\psi_k(x) \propto \mathrm{e}^{-ikx}$, avec $k > 0$.

Chapitre 15

Effet tunnel

15.1 Particule dans un potentiel

Soit un potentiel $V(x)$ par morceaux formé de marches successives (figure 15.1).

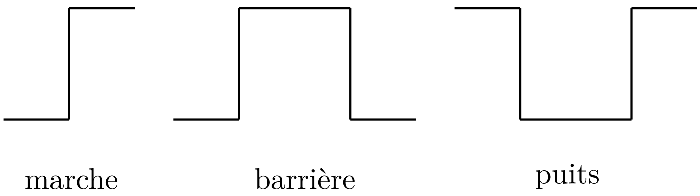

FIGURE 15.1 – Types de potentiels.

Soit H le hamiltonien du système. Dans une région donnée à V constant, il vaut

$$H = \frac{p^2}{2m} + V \tag{15.1}$$

L'équation des états stationnaires s'écrit

$$H\psi = E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi \tag{15.2}$$

qui se récrit

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \tag{15.3}$$

où E ne dépend pas de x (V dépend du problème considéré).

On pose

$$\begin{cases} k = \sqrt{\dfrac{2m(E-V)}{\hbar^2}} & E > V \\ k = \sqrt{\dfrac{2m(V-E)}{\hbar^2}} & E < V \end{cases} \tag{15.4}$$

Les solutions sont alors de la forme

$$\begin{cases} \psi(x) = A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-ikx} & E > V \\ \psi(x) = A\,\mathrm{e}^{kx} + B\,\mathrm{e}^{-kx} & E < V \end{cases} \tag{15.5}$$

La première solution correspond à une superposition d'onde plane. La seconde comprend des exponentielles réelles.

15.2 Effet tunnel à travers une barrière

Le potentiel est de la forme

$$\begin{cases} V(x) = 0 & x < 0, x > a \\ V(x) = V_0 & 0 \leq x \leq a \end{cases} \tag{15.6}$$

On considère un particule qui vient de la gauche, avec $E < V_0$. On aura donc
- $x < 0$:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{15.7a}$$

$$\psi_1 = A_1 \, \mathrm{e}^{ikx} + B_1 \, \mathrm{e}^{-ikx} \tag{15.7b}$$

- $0 \leq x \leq a$:

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{15.8a}$$

$$\psi_2 = A_2 \, \mathrm{e}^{\kappa x} + B_2 \, \mathrm{e}^{-\kappa x} \tag{15.8b}$$

- $x > a$:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{15.9a}$$

$$\psi_3 = A_3 \, \mathrm{e}^{ikx} \tag{15.9b}$$

car on considère uniquement l'onde qui va de gauche à droite.

On veut calculer le coefficient de transmission

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}$$

qui correspond au rapport de la densité de probabilité transmise sur celle incidente. Pour raccorder les fonctions, on utilise la continuité de ψ et de ψ'.
- $x = 0$:

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \\ ik(A_1 - B_1) = \kappa(A_2 - B_2) \end{cases} \tag{15.10}$$

- $x = a$:

$$\begin{cases} A_2 \, \mathrm{e}^{\kappa a} + B_2 \, \mathrm{e}^{-\kappa a} = A_3 \, \mathrm{e}^{ika} \\ \kappa(A_2 \, \mathrm{e}^{\kappa a} - B_2 \, \mathrm{e}^{-\kappa a}) = ikA_3 \, \mathrm{e}^{ika} \end{cases} \tag{15.11}$$

(15.11) donne $B_2 \, \mathrm{e}^{-\kappa a}$ en fonction de $A_2 \, \mathrm{e}^{\kappa a}$: $B_2 \propto A_2 \, \mathrm{e}^{2\kappa a}$. (15.10) donne A_1 en fonction de A_2 et B_2, et on peut trouver une relation entre A_2 et A_1 : $A_2 = c_1 A_1 + c_2 A_2 \, \mathrm{e}^{2\kappa a}$, ce qui donne

$$A_2 = A_1 \frac{c_1}{1 - c_2 \, \mathrm{e}^{2\kappa a}} \tag{15.12a}$$

$$B_2 \propto A_1 \frac{c_1}{1 - c_2 \, \mathrm{e}^{2\kappa a}} \, \mathrm{e}^{2\kappa a} \tag{15.12b}$$

et alors

$$A_2\,\mathrm{e}^{ika} = A_1 \frac{c_1}{1 - c_2\,\mathrm{e}^{2\kappa a}}\,\mathrm{e}^{\kappa a} + A_1 \frac{c_1 c_3}{1 - c_2\,\mathrm{e}^{2\kappa a}}\,\mathrm{e}^{\kappa a} = A_1 \frac{c_1(1 + c_3)}{1 - c_2\,\mathrm{e}^{2\kappa a}}\,\mathrm{e}^{\kappa a}$$

donc

$$A_3 \neq 0 \tag{15.13}$$

Dans la limite $\kappa \gg 1$, on a

$$|A_3| \propto |A_1|\,\mathrm{e}^{-\kappa a} \tag{15.14}$$

et

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2}\,\mathrm{e}^{-2\kappa a} \tag{15.15}$$

Définition 15.1 (Effet tunnel)**.** La probabilité de passage avec $E < V_0$ est non nulle et dépend exponentiellement de

$$\kappa a = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}a \tag{15.16}$$

Exemple 15.1 (Ordre de grandeur)**.**
On considère un électron dans un microscope à effet tunnel (STM) : la distance entre la pointe et l'objet est a. Alors

$$V_0 - E \approx 8 \times 10^{-19}\,\mathrm{J\,s} \qquad m \approx 10^{-30}\,\mathrm{kg} \qquad a = 1\,\mathrm{nm}$$

alors $\kappa a \approx 10$.

Avec un tel dispositif, il est possible de sonder la surface d'un matériau.

Chapitre 16

Généraltion à trois dimensions

On considère une particule à trois degrés de libertés : x, y, z. La fonction d'onde est alors $\psi(x,y,z)$ et

$$\psi(x,y,z) = \langle\, x,y,z|\, \psi\rangle \tag{16.1}$$

L'opérateur position, noté $\vec{r}$, est défini par trois opérateurs : $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$. L'opérateur $\vec{p}$ est défini lui aussi par trois opérateurs : $\hat{p}_x$, $\hat{p}_y$, $\hat{p}_z$. On a de plus

$$\vec{p} = \frac{\hbar}{i}\,\nabla = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{16.2}$$

L'opérateur énergie cinétique est

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$$

L'action de $\vec{p}^{\,2}/2m$ sur $\psi(x,y,z)$ est

$$\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\,\psi \tag{16.3}$$

Le hamiltonien est

$$H = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(x,y,z) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\,\psi + V(x,y,z) \tag{16.4}$$

L'équation de Schrodinger devient alors

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,y,z,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\,\psi(x,y,z,t) + V(x,y,z)\psi(x,y,z,t) \tag{16.5}$$

L'équation des états stationnaires est

$$H\psi = E\psi \Longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\,\psi + (V-E)\psi = 0 \tag{16.6}$$

L'intégrale simple devient une intégrale triple sur tout l'espace :

$$\int_{\mathbb{R}} \cdots \mathrm{d}x \longrightarrow \int_{\mathbb{R}^3} \cdots \mathrm{d}^3 r$$

Les opérateurs de position et d'impulsion commutent respectivement, c'est à dire que l'on a

$$[\hat{r}_i, \hat{r}_j] = 0 \tag{16.7a}$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \tag{16.7b}$$

Les relations de commutation canoniques sont

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = [\hat{y}, \hat{p}_y] = [\hat{z}, \hat{p}_z] = i\hbar \tag{16.8}$$

et

$$[\hat{r}_i, \hat{p}_j] = 0 \qquad i \neq j \tag{16.9}$$

Chapitre 17

Oscillateurs harmoniques quantiques

17.1 Définitions

On considère un oscillateur harmonique à une dimension de masse m et soumis au potentiel

$$V(x) = \frac{kx^2}{2} \tag{17.1}$$

où k est la constante de rappel.

L'énergie totale est alors

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \tag{17.2}$$

On définit la fréquence propre de l'oscillateur par

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{17.3}$$

L'hamiltonien est donné par

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 \tag{17.4}$$

L'objectif est de trouver les états stationnaires grâce à l'équation de Schrödinger (6.2) :

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

c'est à dire

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}mx^2\psi = E\psi \tag{17.5}$$

17.2 Niveaux d'énergie

17.2.1 Opérateurs a et $a^\dagger$

On définit les opérateurs de création et d'annihilation respectivement par

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - i\frac{p}{m\omega}\right) \tag{17.6a}$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + i\frac{p}{m\omega}\right) \tag{17.6b}$$

Ces deux opérateurs sont adjoints l'un de l'autre et non hermitiens. De plus, ils ne sont pas associés à une grandeur physique.

On définit aussi l'opérateur

$$\hat{N} = a^\dagger a \tag{17.7}$$

appelé nombre.

Calculons le commutateur des opérateurs de création et d'annihilation :

$$\begin{aligned}
\left[a, a^\dagger\right] &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left[x + i\frac{p}{m\omega}, x - i\frac{p}{m\omega}\right] \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\frac{-i}{m\omega}[x,p] + \frac{i}{m\omega}[p,x]\right) \\
&= \frac{1}{2\hbar}\left(-i(i\hbar) + i(-i\hbar)\right) \\
&= 1
\end{aligned}$$

d'où la relation

$$aa^\dagger = 1 + a^\dagger a \tag{17.8}$$

On réécrit $a^\dagger a$:

$$\begin{aligned}
a^\dagger a &= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x + i\frac{p}{m\omega}\right)\left(x - i\frac{p}{m\omega}\right) \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2}\right) + \frac{i}{2\hbar}[x,p] \\
&= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{p^2}{2m}\right) - \frac{1}{2}
\end{aligned}$$

donc

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

ce qui permet d'écrire l'hamiltonien sous la forme

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \tag{17.9}$$

ou encore

$$H = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right) \tag{17.10}$$

17.2.2 Valeurs propres des opérateurs de création et d'annihilation

On a

$$\begin{aligned}
\left[a^\dagger a, a\right] &= a^\dagger \underbrace{[a,a]}_{=0} + \underbrace{\left[a^\dagger, a\right]}_{=-1} a = -a \\
\left[a^\dagger a, a^\dagger\right] &= a^\dagger \underbrace{\left[a, a^\dagger\right]}_{=1} + \underbrace{\left[a^\dagger, a^\dagger\right]}_{=0} a = a^\dagger
\end{aligned}$$

alors

$$Na = -a + aN \tag{17.11a}$$

$$Na^\dagger = a^\dagger + a^\dagger N \tag{17.11b}$$

Soit $|\phi_u\rangle$ un état propre de N de valeur propre u. Comme H et N commutent, ils possèdent une base de vecteurs propres commune. Regardons l'action de N sur $a^\dagger |\phi_u\rangle$:

$$\begin{aligned}
Na^\dagger |\phi_u\rangle &= (a^\dagger + a^\dagger N) |\phi_u\rangle \\
&= a^\dagger |\phi_u\rangle + a^\dagger N |\phi_u\rangle \\
&= (u+1) a^\dagger |\phi_u\rangle
\end{aligned}$$

$a^\dagger |\phi_u\rangle$ est donc aussi vecteur propre de N avec $(u+1)$ comme valeur propre.

De même, on calcule l'action de N sur $a |\phi_u\rangle$:

$$\begin{aligned}
Na |\phi_u\rangle &= (-a + aN) |\phi_u\rangle \\
&= -a |\phi_u\rangle + aN |\phi_u\rangle \\
&= (u-1) a^\dagger |\phi_u\rangle
\end{aligned}$$

$a |\phi_u\rangle$ est donc aussi vecteur propre de N avec $(u-1)$ comme valeur propre.

Cherchons la norme de $a |\phi_u\rangle$: le bra associé est $\langle\phi_u| a^\dagger$. On a donc

$$\begin{aligned}
\left|a |\phi_u\rangle\right|^2 &= \langle\phi_u| a^\dagger a |\phi_u\rangle \\
&= \langle\phi_u| u |\phi_u\rangle \\
&= u \left||\phi_u\rangle\right|^2 \geq 0
\end{aligned}$$

donc on déduit

$$u \geq 0 \tag{17.12}$$

Ainsi les valeurs propres de N sont toujours positives. Si $a |\phi_u\rangle \geq 0$ alors $(u-1)$ est valeur propre de N.

À chaque fois que l'on applique a, on diminue le u de 1. Il y aura donc un u minimum, tel que $u_{min} - 1$ ne soit pas valeur propre de N, c'est à dire $a |\phi_{u_{min}}\rangle = 0$. Cela implique $u_{min} = 0$.

17.2.3 Détermination des niveaux d'énergie

Les valeurs propres de N sont les nombres entiers positifs. Or on avait l'équation (17.10) :

$$H = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

Le spectre de l'oscillateur harmonique est donc quantifié : les niveaux d'énergie sont équidistants, séparés de $\hbar\omega$. On déduit la forme des niveaux d'énergie :

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \tag{17.13}$$

où $\hbar\omega$ est le quantum d'énergie.

Le niveau fondamental n'est pas nul et vaut

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{17.14}$$

On l'appelle *énergie de point zéro.*

17.2.4 Interprétations des opérateurs

L'opérateur création augmente l'énergie d'un quantum tandis que l'opérateur d'annihilation diminue cette énergie d'un quantum, d'où leurs noms.

Remarque : Dans le hamiltonien, a et $a^\dagger$ vont toujours par paire : $a^\dagger a$ conserve l'énergie

17.3 États propres du hamiltonien

17.3.1 État fondamental

Les états propres sont notés $|n\rangle$, avec $n \in \mathbb{N}$.

On a

$$a\,|0\rangle = 0 \Longrightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + i\frac{p}{m\omega} \right) |0\rangle = 0$$

qui donne l'équation

$$\hat{x}\,|0\rangle + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\,|0\rangle = 0 \tag{17.15}$$

Une fonction d'onde $\psi_0(x) = \langle\, x |\, 0 \rangle$ vérifie

$$x\psi_0(x) + \frac{i}{m\omega}\,\frac{\hbar}{i}\,\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x}(x) = 0 \tag{17.16}$$

qui admet une unique solution à une constante près. Il n'y a donc qu'un seul état $|0\rangle$ associé à E_0, ce qui implique que le niveau fondamental n'est pas dégénéré, et donc a non plus.

On peut finalement dire que les états propres de H forment une base infinie dénombrable de l'état de Hilbert.

17.3.2 Fonctions d'onde

On cherche à normer les vecteurs propres $|n\rangle$:

$$\begin{aligned} |a\,|n\rangle|^2 &= \langle n|a^\dagger a\,|n\rangle \\ &= \langle n|n\,|n\rangle \\ &= n\,\langle\, n|\, n\rangle = n \end{aligned}$$

$a\,|n\rangle$ a pour valeur propre $(n-1)$, donc

$$a\,|n\rangle = c\,|n-1\rangle$$
$$\langle n|a^\dagger = c^*\langle n-1|$$

ce qui donne

$$\langle n|a^\dagger a\,|n\rangle = c^* c\,\langle\, n-1|\, n-1\rangle = |c|^2$$

donc $|c|^2 = n$. On choisit $c = \sqrt{n}$, pour obtenir finalement

$$a\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{17.17}$$

De même

$$a^\dagger\,|n\rangle = c'\,|n+1\rangle$$

ce qui donnera $|c'|^2 = n+1$, donc

$$a^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{17.18}$$

On peut déduire

$$a^\dagger\,|n-1\rangle = \sqrt{n}\,|n\rangle \tag{17.19}$$

d'où

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger\,|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}(a^\dagger)^2\,|n-2\rangle = \cdots$$

ce qui donne

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n\,|0\rangle \tag{17.20}$$

L'équation pour l'état fondamental se résout en

$$\psi_0(x) = A\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\,x^2\right) \tag{17.21}$$

qui est une gaussienne.

On détermine A par normalisation de ψ_0 :

$$\int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\,x^2\right) \mathrm{d}x = |A|^2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{\pi} = 1$$

d'où

$$A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{17.22}$$

et la solution devient

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\,x^2\right) \tag{17.23}$$

En utilisant la relation (17.18), on obtient

$$\psi_1(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\,x^2\right) \tag{17.24}$$

Si n est impair, la fonction d'onde est antisymétrique, sinon, elle est symétrique.

17.3.3 Action de $\hat{x}$ et $\hat{p}$

$\hat{x}$ et $\hat{p}$ peuvent s'exprimer en fonction de a et $a^\dagger$:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger) \tag{17.25a}$$

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}i(a^\dagger - a) \tag{17.25b}$$

et alors

$$\hat{x}\,|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle) \tag{17.26a}$$

$$\hat{p}\,|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}i(\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle - \sqrt{n}\,|n-1\rangle) \tag{17.26b}$$

On dit que x et p réalisent un couplage des différents états $|n\rangle$. Sous forme matricielle, on peut écrire

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \ddots & \\ & \vdots & & & \end{pmatrix} \tag{17.27a}$$

$$\hat{p} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & \\ i & 0 & -i\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & i\sqrt{2} & 0 & -i\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & \ddots & \\ & \vdots & & & \end{pmatrix} \tag{17.27b}$$

17.3.4 Valeurs moyennes et fluctuations

Dans un état $|n\rangle$ on a

$$\langle n|x\,|n\rangle = 0 \tag{17.28a}$$

$$\langle n|p\,|n\rangle = 0 \tag{17.28b}$$

Pour calculer les fluctuations, cherchons x^2 :

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(a^2 + (a^\dagger)^2 + 2a^\dagger a + 1) \end{aligned}$$

donc

$$\begin{aligned} \langle n|x^2\,|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\langle n|a^2\,|n\rangle + \langle n|(a^\dagger)^2\,|n\rangle + 2\langle n|a^\dagger a\,|n\rangle + \langle\, n|\, n\rangle\right) \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1) \end{aligned}$$

et donc

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)} \tag{17.29}$$

De même, on a

$$\Delta p = \sqrt{m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)} \tag{17.30}$$

Finalement on a

$$\Delta x \Delta p = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) \geq \frac{\hbar}{2} \tag{17.31}$$

L'état fondamental sature l'inégalité de Heisenberg (5.6) :

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

Les valeurs moyennes des énergies cinétiques et potentielles sont :

$$\langle n| E_c |n\rangle = \langle n| \frac{p^2}{2m} |n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$
$$\langle n| E_p |n\rangle = \langle n| \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 |n\rangle = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

c'est à dire

$$\langle n| E_c |n\rangle = \frac{E_n}{2} \tag{17.32a}$$
$$\langle n| E_p |n\rangle = \frac{E_n}{2} \tag{17.32b}$$

17.4 Théorème d'Ehrenfest

17.4.1 Énoncé

Soit un opérateur A indépendant du temps. On regarde la valeur moyenne en fonction du temps de A à l'état $|\psi\rangle$:

$$\langle A\rangle_t = \langle\psi(t)| A |\psi(t)\rangle \tag{17.33}$$

On regarde sa dérivée par rapport au temps :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle_t = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\langle\psi(t)|\right) A |\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)| A \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(|\psi(t)\rangle\right)$$

On fait apparaitre l'équation de Schrödinger et sa conjuguée :

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}t} = H\psi$$
$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}t} = \psi H$$

ce qui donne

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle A\right\rangle_t &= \frac{-1}{i\hbar}\langle\psi|HA\left|\psi\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|AH\left|\psi\right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|AH - HA\left|\psi\right\rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar}\langle\psi|\left[A,H\right]\left|\psi\right\rangle\end{aligned}$$

ce qui donne l'équation

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle A\right\rangle_t = \frac{1}{i\hbar}\left\langle [A,H]\right\rangle_t \tag{17.34}$$

17.4.2 Application à l'oscillateur harmonique

On a

$$\begin{aligned}[x,H] &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left([a,N] + \left[a^\dagger, N\right]\right) \\ &= \hbar\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a - a^\dagger)\end{aligned}$$

et puisque

$$a - a^\dagger = i\sqrt{\frac{2}{\hbar m\omega}}p$$

on a

$$[x,H] = \frac{i\hbar}{m}p \tag{17.35}$$

d'où

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle x\right\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m} \tag{17.36}$$

Le théorème d'Ehrenfest représente donc des valeurs moyennes qui obéissent aux équations classiques.

De même on a

$$\begin{aligned}[p,H] &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\frac{\hbar\omega}{i}\left([a,N] - \left[a^\dagger, N\right]\right) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\frac{\hbar\omega}{i}(a + a^\dagger) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\frac{\hbar\omega}{i}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x \\ &= \frac{\hbar m\omega^2}{i}x\end{aligned}$$

donc

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle p\right\rangle = \frac{1}{i\hbar}\frac{\hbar m\omega^2}{i}\left\langle x\right\rangle$$

or

$$\left\langle p\right\rangle = m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle x\right\rangle$$

donc on obtient

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\left\langle x\right\rangle + \omega^2\left\langle x\right\rangle = 0 \tag{17.37}$$

qui est l'équation classique de l'oscillateur.

Les solutions sont de la forme

$$\langle x\rangle = A\cos\omega t + B\sin\omega t \tag{17.38}$$

où

$$A = \langle x\rangle\,(t=0) \tag{17.39a}$$

$$\omega B = \frac{1}{m}\langle p\rangle\,(t=0) \tag{17.39b}$$

$$\tag{17.39c}$$

Si $|\psi\rangle$ est un état stationnaire, alors les moyennes sont nulles et il n'y a aucun oscillation temporelle.

17.5 Importance de l'oscillateur harmonique

L'oscillateur est un modèle qui permet de représenter de nombreux phénomènes.

17.5.1 Électron dans un champ magnétique

D'un point de vue classique, on utilise la force de Lorentz $\vec{F} = q\vec{v}\times\vec{B}$. En quantique, on fait intervenir le potentiel vecteur $\vec{A}$ et on trouve que l'équation des états stationnaires est identique à celle d'un oscillateur. On obtient alors les niveaux d'énergie qui sont appelés niveaux de Landau.

On définit la fréquence cyclotron par

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \tag{17.40}$$

qui est à l'origine de l'effet Hall quantique.

17.5.2 Description quantique d'un cristal

On considère le réseau cristallin d'un solide : il s'agiy d'un ensemble d'olscillateurs couplés. On trouve des modes de vibrations indépendants, qui sont appelés modes normaux. À partir de ça, on définit le phono, qui est le quantum d'énergie des modes normaux de vibration. Ce sont des excitations du système, traitées comme des particules.

17.5.3 Objets dans des potentiels harmoniques

Par exemple, les ions piégés ou les électrons confinés dans des puits quantiques, les oscillateurs LC quantique, les circuits supraconducteurs, les bits quantiques...

17.5.4 Modèle de la dissipation d'énergie

La création d'un quantum $\hbar\omega$ symbolise l'absorbtion d'énergie. Un modèle théorique a été développé pour décrire l'absorbtion et l'émission d'énergie irréversible : pour ce faire, on considère un ensemble infini d'oscillateurs harmoniques : il s'agit du modèle du bain d'oscillateurs.

Chapitre 18

Système à deux niveaux

18.1 Description

18.1.1 Problématique

On veut étudier l'évolution limitée dans la région à deux états. Un système exact est le spin de l'électron, sinon il faudra toujours procéder à des approximations.

Il faut réduire la dimension de l'espace de Hilbert pour obtenir un espace de dimension 2.

18.1.2 Définitions

On se restreint à une base de Hilbert de dimension 2, notée $(|0\rangle, |1\rangle)$. L'état le plus général sera une combinaison linéaire des deux vecteurs de base :

$$|\psi\rangle = \alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle \qquad \alpha, \beta \in \mathbb{C} \tag{18.1}$$

et si $|\psi\rangle$ est normé, on aura

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{18.2}$$

On écrit

$$|\alpha| = \cos\frac{\theta}{2} \tag{18.3a}$$

$$|\beta| = \sin\frac{\theta}{2} \tag{18.3b}$$

θ est donc l'angle défini par

$$\tan\frac{\theta}{2} = \left|\frac{\beta}{\alpha}\right| \qquad 0 \leq \theta \leq \pi \tag{18.4}$$

On a donc

$$\alpha = \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\phi_\alpha} \tag{18.5a}$$

$$\beta = \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\phi_\beta} \tag{18.5b}$$

On pose

$$\phi = \phi_\beta - \phi_\alpha \tag{18.6}$$

et donc

$$|\psi\rangle = \mathrm{e}^{i\phi_\alpha}\left(\cos\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\phi}\,|1\rangle\right)$$

que l'on peut simplifier en

$$|\psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\phi}\,|1\rangle \tag{18.7}$$

18.1.3 Sphère de Bloch

L'état $|\psi\rangle$ est déterminé par (θ, ϕ), avec $0 \le \theta \le \pi$ et $0 \le \phi \le 2\pi$. Il est donc possible de représenter l'état $|\psi\rangle$ sur la sphère de rayon unité par un point. On appelle cette sphère la sphère de Bloch. Le pôle nord est l'état $|0\rangle$ et le pôle sud l'état $|1\rangle$.

On a les relations

$$|\psi\rangle\,(\pi/2, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \tag{18.8a}$$

$$|\psi\rangle\,(\pi/2, \pi/2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i\,|1\rangle) \tag{18.8b}$$

18.2 Hamiltonien d'un système à deux niveaux

18.2.1 Forme générale

L'hamiltonien est représenté par une matrice hermitique :

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \tag{18.9}$$

avec $H_{21} = H_{12}^*$. On écrit H sous la forme

$$H = H_0 + W \tag{18.10}$$

où H_0 est un hamiltonien dont $|0\rangle$ et $|1\rangle$ sont les états propres avec

$$H_0\,|0\rangle = E_0\,|0\rangle$$
$$H_0\,|1\rangle = E_1\,|1\rangle$$

On dit que H_0 est le hamiltonien initial (ou non perturbé) et

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} \tag{18.11}$$

W est plus complexe et décrit des phénomènes négligés dans H_0, et qui sont habituellement négligés (devant E_0 et E_1) lorsque l'on fait des développements au premier ordre.

Exemple 18.1.
W peut représenter le champ magnétique résiduel pour un spin 1/2, avec

$$W = \begin{pmatrix} 0 & W \\ W^* & 0 \end{pmatrix}$$

où W est le couplage entre $|0\rangle$ et $|1\rangle$. On a $W = \langle 1| H |0\rangle$, et

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & W \\ W^* & E_1 \end{pmatrix}$$

18.2.2 Niveaux d'énergie des états stationnaires

$|0\rangle$ et $|1\rangle$ ne sont plus des états propres de H. La nouvelle équation aux valeurs propres est :

$$\begin{aligned}
\det(H - \lambda I) &= 0 \\
&= \begin{vmatrix} E_0 - \lambda & W \\ W^* & E_1 - \lambda \end{vmatrix} \\
&= (E_0 - \lambda)(E_1 - \lambda) - |W|^2 \\
&\implies \lambda^2 - (E_0 + E_1)\lambda + E_0 E_1 |W|^2 = 0
\end{aligned}$$

d'où

$$\lambda = \frac{(E_0 + E_1) \pm \sqrt{(E_0 - E_1)^2 + 4|W|^2}}{2} \tag{18.12}$$

et donc

$$E_+ = \frac{E_0 + E_1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{(E_0 - E_1)^2 + 4|W|^2} \tag{18.13a}$$

$$E_- = \frac{E_0 + E_1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{(E_0 - E_1)^2 + 4|W|^2} \tag{18.13b}$$

On obtient de nouveaux états stationnaires $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$. On peut écrire

$$|\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2} |0\rangle + \sin\frac{\theta}{2} \mathrm{e}^{i\phi} |1\rangle \tag{18.14a}$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2} |0\rangle + \cos\frac{\theta}{2} \mathrm{e}^{i\phi} |1\rangle \tag{18.14b}$$

On a

$$\langle \psi_- | \psi_+ \rangle = 0 \tag{18.15}$$

donc les deux états sont orthogonaux et seront symétriques dans la sphère de Bloch.

De plus on a les relations

$$\tan\theta = \frac{2|W|}{E_0 - E_1} \tag{18.16}$$

et

$$W = |W| \mathrm{e}^{i\phi} \tag{18.17}$$

Il s'agit alors de faire un changement de base $(|0\rangle, |1\rangle) \to (|\psi_+\rangle, |\psi_-\rangle)$.

18.2.3 Anticroisement de niveaux

Quel est l'effet de W si on varie E_0 et E_1 ? On considère que W est constant (fixé par le matériau étudié). $E_0 - E_1$ est variable, réglable extérieurement (ex. : champ magnétique, tension...). On pose $\delta = E_0 - E_1$, et on regarde ce qui se passe lorsque δ varie autour de $\delta = 0$ (point de dégénérescence).

On définit l'énergie moyenne par

$$E_m = \frac{E_0 + E_1}{2} \tag{18.18}$$

On a alors

$$E_+ = E_m + \frac{1}{2}\sqrt{\delta^2 + 4|W|^2} \tag{18.19a}$$

$$E_- = E_m - \frac{1}{2}\sqrt{\delta^2 + 4|W|^2} \tag{18.19b}$$

On observe bien un anticroisement de niveaux (donc une levée de dégénrescence pour $E_1 = E_0$), quand il y a le couplage W (figure 18.1).

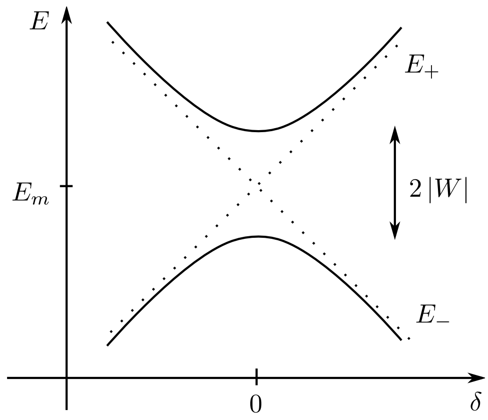

FIGURE 18.1 – Anticroisement de niveaux.

Pour $\delta = 0$, on a $E_+ = E_m + |W|$ et $E_- = E_m - |W|$. L'énergie non perturbée est une signature du comportement quantique du système.

On a $\tan\theta \to \infty$ si $\theta \to \pi/2$ et on déduit

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{i\phi}\,|1\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}\,|0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\,\mathrm{e}^{i\phi}\,|1\rangle$$

Si W est réel on a

$$|\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$|\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

Chapitre 19

Spin 1/2 en champ magnétique

- Moment magnétique : $\vec{\mu}$.
- Moment cinétique de spin $\vec{S}$.

Il sont reliés par

$$\vec{\mu} = \gamma \vec{S} \tag{19.1}$$

Pour l'électron on a

$$\gamma = -\frac{e}{m_e} \tag{19.2}$$

Le spin 1/2 est un espace de Hilbert de dimension 2. Les S_i ($i = x, y, z$) sont des opérateurs.

L'énergie du moment magnétique dans un champ magnétique $\vec{B}$ est

$$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \tag{19.3}$$

L'hamiltonien d'un spin 1/2 en champ magnétique est donc

$$H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\gamma(S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z) \tag{19.4}$$

que l'on récrit sous forme matricielle :

$$H = -\gamma \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B_z & B_x - iB_y \\ B_x + iB_y & B_z \end{pmatrix} \tag{19.5}$$

Nous travaillerons en coordonnées sphériques. Le champ magnétique $\vec{B}$ s'-exprime alors sous la forme

$$\begin{cases} B_x = B \sin\theta \cos\phi \\ B_y = B \sin\theta \sin\phi \\ B_z = B \cos\theta \end{cases} \tag{19.6}$$

ce qui permet d'écrire H :

$$H = -\frac{\gamma \hbar B}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \mathrm{e}^{-i\phi} \sin\theta \\ \mathrm{e}^{i\phi} \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{19.7}$$

On pose

$$\omega_0 = -\gamma B \tag{19.8}$$

Les valeurs propres de H sont $\pm\hbar\omega_0/2$.

Chapitre 20

Évolution libre

La dépendance temporelle d'un état stationnaire $|\psi_n\rangle$ s'écrit

$$|\psi_n\rangle(0) \longrightarrow \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}|\psi_n\rangle$$

dans la suite nous prendrons l'exemple du spin 1/2 dans un champ magnétique vertical, c'est à dire tel que $\vec{B} = (0, 0, B_0)$. On a donc

$$H = -\gamma B_0 S_z = \frac{\hbar\omega_0}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
$$E_\pm = \pm\frac{\hbar\omega_0}{2}$$

Il y a deux états stationnaires

$$\mathrm{e}^{-iE_0t/\hbar}|+\rangle = \mathrm{e}^{-i\omega_0t/2}|+\rangle$$
$$\mathrm{e}^{-iE_0t/\hbar}|-\rangle = \mathrm{e}^{i\omega_0t/2}|-\rangle$$

Prenons un état quelconque à $t = 0$:

$$|\psi(t=0)\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$$

et

$$|\psi(t)\rangle = \alpha\,\mathrm{e}^{-i\omega_0t/2}|+\rangle + \beta\,\mathrm{e}^{i\omega_0t/2}|-\rangle$$

On dit que l'état initial est

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$$

Soit $P_+(t)$ la probabilité de trouver le système dans l'état

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

en fonction du temps :

$$P_+(t) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)\,|\psi(t)\rangle\right|^2$$
$$= \left|\cos\frac{\omega_0 t}{2}\right|^2$$

c'est à dire

$$P(t) = \cos^2 \frac{\omega_0 t}{2} \tag{20.1}$$

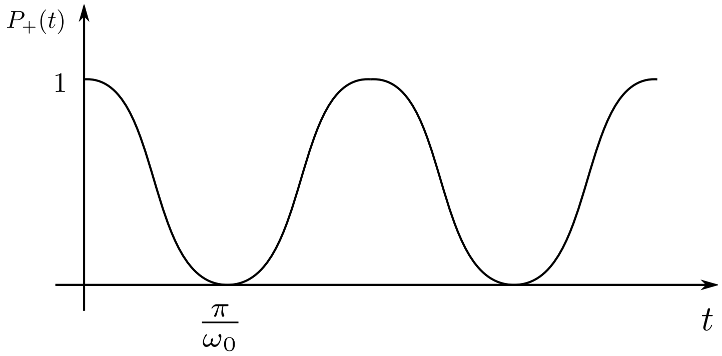

FIGURE 20.1 – Probabilité de $P_+(t)$.

On peut calculer la probabilité $P_-(t)$ de trouver le système dans l'état

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$$

grâce à

$$P_-(t) = 1 - P_+(t) \tag{20.2}$$

Sur la sphère de Bloch, cela correspond à une rotation à vitesse angulaire constante.

Chapitre 21

Phénomène de résonance

Il s'agit d'un phénomène d'oscillations quantiques forcées.

On a

$$\begin{aligned}\vec{B} &= \vec{B}_0 + \vec{B}_1(t) \\ &= B_0\vec{e_z} + B_1 \cos\omega t\ \vec{e_{ex}} + B_1 \sin\omega t\ \vec{e_{ey}}\end{aligned}$$

L'hamiltonien dépend donc du temps :

$$H = -\gamma\vec{S}\vec{B} = -\gamma B_0 S_z - \gamma B_1 S_x \cos\omega t - \gamma B_1 S_y \sin\omega t \tag{21.1}$$

On pose

$$\omega_0 = -\gamma B_0 \tag{21.2a}$$

$$\omega_1 = -\gamma B_1 \tag{21.2b}$$

donc la matrice de l'hamiltonien est

$$H = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \\ \omega_1\,\mathrm{e}^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \tag{21.3}$$

On procède au changement de variable

$$\begin{cases} b_+(t) = \mathrm{e}^{i\omega t/2} a_+(t) \\ b_-(t) = \mathrm{e}^{-i\omega t/2} a_-(t) \end{cases} \tag{21.4}$$

afin d'éliminer la dépendance au temps (par contre l'espace de Hilbert dépend lui du temps).

On aura donc

$$\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle = b_+(t)\left|+\right\rangle + b_-(t)\left|-\right\rangle \tag{21.5}$$

et l'équation de Schrödinger est alors

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \omega_0 - \omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega - \omega_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} \tag{21.6}$$

$\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle$ évolue dans champ fixe, donc l'hamiltonien ne dépend plus du temps.

Il faut trouver les expressions de b_+ et b_-, pour ensuite revenir à a_+ et a_-. On trouve l'équation différentielle

$$\ddot{b}_\pm + \frac{\Omega}{4}\, b_\pm = 0 \tag{21.7}$$

en posant

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2} \tag{21.8}$$

La solution est donc

$$b_\pm(t) = A_\pm \cos\frac{\Omega}{2}t + B_\pm \sin\frac{\Omega}{2}t \tag{21.9}$$

On prend $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ et donc

$$\begin{array}{ll} a_+(0) = 1 & a_-(0) = 0 \\ b_+(0) = 1 & b_-(0) = 0 \end{array}$$

On a

$$\frac{\mathrm{d}b_-}{\mathrm{d}t}(t=0) = \frac{\omega_1}{2i}$$

donc

$$b_-(t) = -i\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega}{2}t \tag{21.10}$$

et de la même manière on trouve

$$b_+(t) = \cos\frac{\Omega}{2}t + i\frac{\omega - \omega_0}{\Omega}\sin\frac{\Omega}{2}t \tag{21.11}$$

On appelle $P_-(t)$ la probabilité de trouver le système dans l'état $|-\rangle$ à l'instant t, alors

$$\begin{aligned} P_-(t) &= |\langle -|\, \psi(t)\rangle|^2 \\ &= |\langle -|(a_+\,|+\rangle + a_-\,|-\rangle)|^2 \\ &= |a_-(t)|^2 = |b_-(t)|^2 \end{aligned}$$

c'est à dire

$$P_-(t) = \frac{\omega_1^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2}\sin^2\frac{\Omega}{2}t \tag{21.12}$$

Il s'agit de la formule de Rabi.

Chapitre 22

Particules identiques en mécanique quantique

22.1 Indiscernabilité

22.1.1 Classique et quantique

- Objet classique : la position est forcément définie, donc deux particules ne peuvent être au même endroit au même moment et elles sont toujours discernables.
- Objet quanquite : la position n'est pas forcément définie, donc la notion de trajectoire n'a pas de sens. Il faut utiliser l'état $|\psi\rangle$.

La question qui se pose est de savoir si deux particules peuvent se retrouver dans le même état $|\psi\rangle$. Pour répondre à cette question, nous travaillerons avec des particules identiques, c'est à dire des particules dont tous les propriétés intrinsèques (masse, spin, charge...) sont les mêmes.

Il est impossible de distinguer deux particules en mécanique quantique, puisque l'on ne peut pas représenter (ni même connaitre) leurs trajectoires : deux particules quantiques sont donc réellement indiscernables.

22.1.2 Problème d'indétermination

Prenons l'exemple de deux particules identiques dans un potentiel harmonique. L'hamiltonien s'écrit :

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_2^2 \tag{22.1}$$

L'espace de Hilbert est formé par le produit tensoriel des espaces à une particule et la fonction d'onde est

$$\psi(x_1, x_2) = (\langle x_1| \langle x_2|)\, |\psi\rangle \tag{22.2}$$

La base est constituée des produits des fonctions à une particule $\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots$. L'état fondamental, où les deux particules sont dans l'état $|0\rangle$ est

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_0(x_2) \tag{22.3}$$

Un état excité correspond à l'état où seule une particule est dans l'état fondamental et où l'autre est dans l'état $|1\rangle$ correspond par exemple à

$$\psi(x_1, x_2) = \phi_0(x_1)\phi_1(x_2)$$
$$\psi(x_1, x_2) = \phi_1(x_1)\phi_0(x_2)$$
$$\psi(x_1, x_2) = \alpha\phi_0(x_1)\phi_1(x_2) + \beta\phi_1(x_1)\phi_0(x_2)$$

Mais un problème se pose : une situation physique est définie par un ensemble de valeurs propres complet, mais il y a plusieurs états possibles.

Si

$$\psi = \alpha\,|0\rangle_1\,|1\rangle_2 + \beta\,|1\rangle_1\,|0\rangle_2$$

on peut montrer que

$$\langle\psi|x_1 x_2\,|\psi\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}\Re(a^*\beta)$$

donc pour des valeurs différentes de α et β on a pas le même résultat.

La mécanique quantique choisit $\alpha = \beta$ ou $\alpha = -\beta$.

22.2 Échange et symétrie pour deux particules

22.2.1 Opérateur d'échange

La base associée à la particule 1 est $\{|k\rangle\}$ et celle associée à la particule 2 est $\{|n\rangle\}$. La base de l'espace des deux particules est donc $|k\rangle\,|n\rangle$ et

$$|\psi\rangle = \sum_{k,n} c_{k,n}\,|k\rangle_1\,|n\rangle_2 \tag{22.4}$$

Définition 22.1 (Opérateur d'échange)**.** On définit l'opérateur d'échange (ou de permutation) P_{12} par

$$P_{12}\,|k\rangle_1\,|n\rangle_2 = |n\rangle_1\,|k\rangle_2 \tag{22.5}$$

Proposition 22.1. On a la propriété suivante :

$$P_{12}^2 = \mathrm{id} \tag{22.6}$$

P_{12} agit sur tous les degrés de libertés.

Exemple 22.1.

Deux particules de spin 1/2 possèdent quatre degrés de libertés. $|k\rangle$ contient les indices pour repérer la fonction d'onde,c'est à dire $\psi(x, y, z)$ et le spin. Par exemple

$$\mathrm{e}^{ik_x x}\,\mathrm{e}^{ik_y y}\,\mathrm{e}^{ik_z z}\,|+\rangle = |k_x, k_y, k_z, +\rangle = |k\rangle$$

pour une fonction de la forme $\psi(x, y, z)\,|\sigma\rangle$.

Si un état à deux particules (spin) s'écrit

$$|\psi\rangle = \psi_a(x_1, y_1, z_1)\psi_b(x_2, y_2, z_2)\,|\sigma\rangle_1\,|\sigma'\rangle_2$$

alors

$$P_{12}\,|\psi\rangle = \psi_b(x_1, y_1, z_1)\psi_a(x_2, y_2, z_2)\,|\sigma'\rangle_1\,|\sigma\rangle_2$$

22.2.2 Symétrie des états à deux particuels

L'indiscernabilité quantique a pour conséquence que $|\psi\rangle$ et $P_{12}|\psi\rangle$ représente le même état, à un facteur de phase près :

$$P_{12}|\psi\rangle = e^{i\phi}|\psi\rangle \tag{22.7}$$

et alors

$$P_{12}^2|\psi\rangle = e^{2i\phi}|\psi\rangle = |\psi\rangle \tag{22.8}$$

donc

$$e^{2i\phi} = 1$$

et

$$e^{i\phi} = \pm 1 \tag{22.9}$$

c'est à dire

$$P_{12}|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle \tag{22.10}$$

– Si $P_{12}|\psi\rangle = |\psi\rangle$, alors $|\psi\rangle$ est symétrique, c'est à dire que

$$c_{k,n} = c_{n,k} \tag{22.11}$$

– Si $P_{12}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$, alors $|\psi\rangle$ est antisymétrique, c'est à dire que

$$c_{k,n} = -c_{n,k} \tag{22.12}$$

On pourra donc écrire

$$|\psi_s\rangle = \sum_{k,n} c_{k,n}\Big(|k\rangle_1|n\rangle_2 + |n\rangle_1|k\rangle_2\Big)$$
$$|\psi_{as}\rangle = \sum_{k,n} c_{k,n}\Big(|k\rangle_1|n\rangle_2 - |n\rangle_1|k\rangle_2\Big)$$

Exemple 22.2 (Potentiel harmonique)**.**
Pour un état excité on aura

$$\psi_s(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\phi_0(x_1)\phi_1(x_2) + \phi_1(x_1)\phi_0(x_2)\Big)$$
$$\psi_{as}(x_1,x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(\phi_0(x_1)\phi_1(x_2) - \phi_1(x_1)\phi_0(x_2)\Big)$$

22.3 Principe de Pauli

22.3.1 Fermions et bosons

Les particules quantiques se classent en deux catégories :
– les bosons : l'état de deux particules identiques est symétrique ;
– les fermions : l'état de deux particules identiques est antisymétrique.

Toutes les particules de spin entier sont des bosons (ex. : photon, helium 4...), tandis que celles de spin demi-entier sont des ferminons (ex. : électron, proton...).

Le principe de Pauli va donc définir l'espace des états d'un système de deux particules qui est un sous-espace de l'espace du produit tensoriel.

22.3.2 Principe d'exclusion

Postulat 22.1 (Principe de Pauli)**.** Deux fermions indépendants ne peuvent pas être dans le même état quantique.

22.3.3 N particules identiques

P_{ij} permute les particules i et j. Si les N particules sont des bosons (resp. fermions), $|\psi\rangle$ est totalement symétrique (resp. antisymétrique).

22.3.4 Conséquences du principe de Pauli

Deux spins 1/2

Soient deux particules de spin $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$. En considérant uniquement le degré de liberté dû au spin, on a deux bases : $\{|+\rangle_1, |-\rangle_1\}$ et $\{|+\rangle_2, |-\rangle_2\}$. La base du système est alors $\{|+\rangle_1|+\rangle_2, |-\rangle_1|+\rangle_2, |+\rangle_1|-\rangle_2, |-\rangle_1|-\rangle_2\}$.

Un autre choix de base possible est la base formée des deux ensembles symétrique $\{|\chi_T^+\rangle, |\chi_T^-\rangle, |\chi_T^0\rangle\}$ (états triplets) et antisymétrique $\{|\chi_S\rangle\}$ (état singulet), avec

$$|\chi_T^+\rangle = |+\rangle_1|+\rangle_2 \tag{22.13a}$$

$$|\chi_T^-\rangle = |-\rangle_1|-\rangle_2 \tag{22.13b}$$

$$|\chi_T^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_1|-\rangle_2 + |-\rangle_1|+\rangle_2\Big) \tag{22.13c}$$

$$|\chi_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_1|-\rangle_2 - |-\rangle_1|+\rangle_2\Big) \tag{22.13d}$$

On définit le spin total par

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 = \vec{S}_1 \otimes \mathrm{id}_2 + \mathrm{id}_1 \otimes \vec{S}_2 \tag{22.14}$$

Les états triplets sont des états propres de $\vec{S}^2$, de valeur propre $2\hbar^2$ et de S_z, de valeurs propres $\pm\hbar, 0$. L'état singulet est état propre de $\vec{S}^2$ et S_z, de valeur propre 0 dans les deux cas.

On a aussi la relation

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2) \tag{22.15}$$

et les états triplets et singulets sont états propres de $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$. Par exemple :

$$\begin{aligned}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |\chi_T\rangle &= \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2)|\chi_T\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{2}\left(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right)|\chi_T\rangle \\ &= \frac{\hbar^2}{4}|\chi_T\rangle\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 |\chi_S\rangle &= \frac{\hbar^2}{2}\left(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right)|\chi_S\rangle \\ &= -\frac{3\hbar^2}{4}|\chi_S\rangle\end{aligned}$$

22.3.5 Interaction d'échange

On considère deux électrons. La fonction d'onde possède une partie spatiale et une partie liée au spin. L'hamiltonien s'écrit

$$H = H_1 + H_2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \tag{22.16}$$

La fonction d'onde du système est obtenue par produit de fonctions d'ondes à une particule, et elle doit être antisymétrique :

$$\psi_S = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\Big(\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) + \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)\Big)}_{\text{sym.}} \underbrace{|\chi_S\rangle}_{\text{antisym.}}$$

$$\psi_T = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\Big(\phi_a(\vec{r}_1)\phi_b(\vec{r}_2) - \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)\Big)}_{\text{antisym.}} \underbrace{|\chi_T\rangle}_{\text{sym.}}$$

Les deux facteurs ne peuvent être simultanément antisymétriques sinon on obtiendrait une fonction symétrique.

Soit E_S l'énergie de ψ_S et E_T celle de ψ_T, alors

$$E_S - E_T = 2 \int \phi_a(\vec{r}_1)^* \phi_b(\vec{r}_2)^* H \phi_b(\vec{r}_1)\phi_a(\vec{r}_2)\, \mathrm{d}r_1 \mathrm{d}r_2$$

que l'on note

$$E_S - E_T = 2J \tag{22.17}$$

et que l'on appelle intégrale d'échange.

Cette différence entre le singulet et le triplet peut être écrite avec $\vec{S}_1\vec{S}_2$, en notant le hamiltonien effectif

$$H_{eff} = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T) - (E_S - E_T)\vec{S}_1\vec{S}_2 \tag{22.18}$$

Alors, l'interaction effective de type magnétique s'écrit

$$H_{int} = -2J\vec{S}_1\vec{S}_2 \tag{22.19}$$

$J > 0$ est dû à l'interaction coulombienne.

En conclusion, on peut dire que l'interaction d'échange est responsable du magnétime de la matière et qu'elle est causée par le principe d'exclusion de Pauli et l'interaction coulombienne.

Chapitre 23

États intriqués

Les états intriqués sont des états à deux particules (qui ne sont pas forcément identiques). L'intrication correspond à la non localité de la mécanique quantique.

23.1 Système de deux spins 1/2

Soient deux espaces de Hilbert E_1 (base $(|+\rangle_1, |-\rangle_1)$) et E_2 (base $(|+\rangle_2, |-\rangle_2)$). L'espace du système E est $E = E_1 \otimes E_2$ (dimension 4). S_{zi} est l'opérateur de la composante selon z du spin i :

$$S_{zi} |+\rangle_i = \frac{\hbar}{2} |+\rangle_i$$
$$S_{zi} |-\rangle_i = \frac{-\hbar}{2} |-\rangle_i$$

Dans E_1 :

$$|+\rangle_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad |-\rangle_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$S_{z1} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

La base de E est formée par les couples obtenus avec les bases de E_1 et de E_2

$$|+\rangle_1 \otimes |+\rangle_2 \qquad |+\rangle_1 \otimes |-\rangle_2 \qquad |-\rangle_1 \otimes |+\rangle_2 \qquad |-\rangle_1 \otimes |-\rangle_2$$

Remarque : On emploie les notations simplifiées :
- $|+,+\rangle$
- $|+\rangle |+\rangle$

Soient deux kets $|\psi_1\rangle$ de E_1 et $|\psi_2\rangle$ de E_2, alors

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \\ &= |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle \end{aligned}$$

Dans la base de E_1, $|\psi_1\rangle = \lambda_1 |+\rangle_1 + \mu_1 |-\rangle_1$ et dans la base de E_2, $|\psi_2\rangle = \lambda_2 |+\rangle_2 + \mu_2 |-\rangle_2$. Ainsi

$$\begin{aligned}|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle &= \Big(\lambda_1 |+\rangle_1 + \mu_1 |-\rangle_1\Big)\Big(|\psi_2\rangle = \lambda_2 |+\rangle_2 + \mu_2 |-\rangle_2\Big) \\ &= \lambda_1\lambda_2 |+\rangle_1 |+\rangle_2 + \lambda_1\mu_2 |+\rangle_1 |-\rangle_2 + \mu_1\lambda_2 |-\rangle_1 |+\rangle_2 + \mu_1\mu_2 |-\rangle_1 |-\rangle_2\end{aligned}$$

Il s'agit de la formulation générale d'un produit $|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$.
Si on a un état quelconque de E :

$$|\psi\rangle = \alpha |+,+\rangle + \beta |+,-\rangle + \gamma |-,+\rangle + \delta |-,-\rangle \tag{23.1}$$

Pour pouvroir écrire $|\psi\rangle$ comme produit de deux états de 1 et de 2, i.e $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$, on a la condition nécessaire et suffisante

$$\alpha\delta = \beta\gamma \tag{23.2}$$

23.1.1 Produit de deux opérateurs

On définit $S_{1z} \otimes I_2$ dont l'action sur $|\psi\rangle_1 |\phi\rangle_2$ est

$$\begin{aligned}S_{1z} \otimes \mathrm{id}_2 |\psi\rangle_1 |\phi\rangle_2 &= S_{1z} |\psi\rangle_1 \otimes \mathrm{id}_2 |\phi\rangle_2 \\ &= S_{1z} |\psi\rangle_1 \otimes |\phi\rangle_2\end{aligned}$$

Exemple 23.1.

$$\begin{aligned}S_{1z} \otimes \mathrm{id}_2 |+\rangle |-\rangle &= S_{1z} |+\rangle_1 \otimes \mathrm{id}_2 |-\rangle_2 \\ &= \frac{\hbar}{2} |+\rangle_1 |-\rangle_2\end{aligned}$$

Dans l'espace produit E on écrit S_{1z} au lieu de $S_{1z} \otimes \mathrm{id}_2$ et S_{2z} au lieu de $\mathrm{id}_1 \otimes S_{2z}$.

Exemple 23.2.

$$\begin{aligned}S_{2z} |+\rangle |-\rangle &= \mathrm{id}_1 |+\rangle_1 \otimes S_{2z} |-\rangle_2 \\ &= \frac{-\hbar}{2} |+\rangle |-\rangle\end{aligned}$$

23.2 États intriqués

Définition 23.1 (État intriqué)**.** Un état qui ne peut pas s'écrire comme le produit tensoriel de deux états de spin individuels est dit intriqué.

Exemple 23.3.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle)$$

appartient à E.

Il n'existe aucun $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ tels que

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle) = |\psi_1\rangle\,|\psi_2\rangle$$

Si on prend un état quelconque (23.1), ici on a

$$\alpha = \delta = 0 \qquad \beta = \gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

et $\alpha\delta \neq \beta\gamma$.

Les conséquences sur les mesures effectuées sur un état $|\psi\rangle$ intriqué sont qu'on ne peut plus considérer l'état de la particule 1 et celui de la particule 2 séparément :

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

- $|+,-\rangle$: spin 1 $\uparrow$ et spin 2 $\downarrow$
- $|-,+\rangle$: spin 1 $\downarrow$ et spin 2 $\uparrow$

Une mesure de S_z sur une des deux particules donne une probabilité 1/2 de trouver $\hbar/2$ ou $-\hbar/2$. La mesure d'un spin 1 de $\hbar/2$ entraine la mesure d'un spin 2 de $-\hbar/2$, et inversement.

$$\begin{aligned}
S_{1z}\,|\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}S_{1z}\,|+,-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}S_{1z}\,|-,+\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2}\,|+,-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{-\hbar}{2}\,|-,+\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle - |-,+\rangle)
\end{aligned}$$

$|\phi\rangle$ n'est pas un état propre de S_{1z}.

$$\begin{aligned}
S_{2z}\,|\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}S_{2z}\,|+,-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}S_{2z}\,|-,+\rangle \\
&= \frac{\hbar}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}(-\,|+,-\rangle + |-,+\rangle)
\end{aligned}$$

$|\phi\rangle$ n'est pas un état propre de S_{2z}.

$$\begin{aligned}
S_{1z}S_{2z}\,|\phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}S_{1z}S_{2z}\,|+,-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}S_{1z}S_{2z}\,|-,+\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\hbar}{2}-\hbar 2\,|+,-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{-\hbar}{2}\frac{\hbar}{2}\,|-,+\rangle \\
&= -\frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}(|+,-\rangle + |-,+\rangle)
\end{aligned}$$

Soit $|\phi\rangle$ un état propre de $S_{1z}S_{2z}$ de valeur propre $-\hbar^2/4$.

Il est impossible d'obtenir $\hbar/2$ ou $-\hbar/2$ pour les 2 spins. Les seules possibilités sont les valeurs opposées.

On parle de corrélation entre les résultats de la mesure sur le spin 1 et le spin 2.

Pour un spin 1/2 unique, la mesure de S_z donne $\pm\hbar/2$ avec une probabilité de 1.

Dans un Stern et Gerlarch orienté selon z, deux faisceux sortent, mais $|\chi\rangle = |+\rangle_x$ est un état propre de S_x de valeur propre $\hbar/2$. Si le Stern et Gerlarch est orienté selon x, un seul faisceur sort. Ainsi, pour un état de spin 1/2 unique, il existe toujours une direction qui donne $\hbar/2$ avec une probabilité de 1.

On écrit l'état intriqué en fonction de $|+\rangle_{1x}, |-\rangle_{1x}, |+\rangle_{2x}, |-\rangle_{2x}$:

$$\begin{aligned}
|+\rangle_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{1x} + |-\rangle_{1x}\Big)\\
|-\rangle_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{1x} - |-\rangle_{1x}\Big)\\
|+\rangle_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{2x} + |-\rangle_{2x}\Big)\\
|-\rangle_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{2x} - |-\rangle_{2x}\Big)
\end{aligned}$$

et alors

$$\begin{aligned}
|+\rangle_1 |-\rangle_2 &= \frac{1}{2}\Big(|+\rangle_{1x} + |-\rangle_{1x}\Big)\Big(|+\rangle_{2x} - |-\rangle_{2x}\Big)\\
|-\rangle_1 |+\rangle_2 &= \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{1x} - |-\rangle_{1x}\Big)\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{2x} + |-\rangle_{2x}\Big)
\end{aligned}$$

et donc

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_1 |-\rangle_2 + |-\rangle_1 |+\rangle_2\Big) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+\rangle_{1x} |+\rangle_{2x} - |-\rangle_{1x} |-\rangle_{2x}\Big)$$

Il s'agit encore d'un état intriqué, donc quelque soit la base, $|\phi\rangle$ reste intriqué.

23.3 Inégalités de Bell

Soient deux spin 1/2. On conisdère un système intriqué

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

En A et en B, la mesure est possible par un Stern et Gerlarch dont on peut choisir l'orientation. La distance entre A et B est suffisante pour supprimer tout lien de causalité entre A et B. Soit τ l'écart temporel entre les mesures en A et B. On a

$$\tau \ll \frac{L}{c}$$

On rappelle que pour un état intriqué, il y a corrélation entre la mesure en A et celle en B.

Cette situation donne lieu au paradoxe EPR (Einstein–Podolski–Rosen — 1935). Selon ses auteurs, la corrélation serait due à autre chose (variable cachée). En 1964, un test quantitatif a été mis au point : les inégalités de Bell.

On considère quatre directions de mesures possibles : 2 pour A ($\vec{a}$ et $\vec{a}'$) et 2 pour B ($\vec{b}$ et $\vec{b}'$). On effectue un grand nombre de mesures et on note $A(a)$ le résultat de la mesure selon $\vec{a}$ au point A, et de même pour $A(a'), B(b), B(b')$.

Pour chaque couple, on définit les corrélations $\mathcal{E}$. Par exemple

$$\mathcal{E}(a,b) = \langle A(a)B(b)\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\left(P_{++}(a,b) + P_{--}(a,b) - P_{+-}(a,b) - P_{-+}(a,b)\right)$$

où P_{+-} est la probabilité d'avoir $\hbar/2$ et $-\hbar/2$.

On définit la grandeur

$$S = A(a)B(b) + A(a)B(b') + A(a')B(b') - A(a')B(b)$$

On veut calculer la valeur moyenne

$$S = A(B + B') + A'(B' - B)$$

Les variables cachées sont B et B'. Les mesures donnent soit $\pm\hbar/2$ et $\pm\hbar/2$ ($B + B' = \pm\hbar$ et $B - B' = 0$), soit $\pm\hbar/2$ et $\mp\hbar/2$ ($B + B' = 0$ et $B - B' = \pm\hbar$). Et comme $A, A' = \pm\hbar/2$, alors

$$S = \pm 2\frac{\hbar^2}{4}$$

ce qui donnent les inégalités de Bell

$$-2\frac{\hbar^2}{4} \leq \langle S\rangle \leq 2\frac{\hbar^2}{4} \tag{23.3}$$

En mécanique quantique, on a

$$\langle S\rangle = \mathcal{E}(a,b) + \mathcal{E}(a,b') + \mathcal{E}(a',b') - \mathcal{E}(a',b)$$

que l'on calcule directement dans l'état $|\phi\rangle$. En calculant $P_{++}(a,b)$, etc., pour $|\phi\rangle$, on montre que $\mathcal{E}(a,b) = -\vec{a}\cdot\vec{b}$. On a donc

$$\mathcal{E}(a,b) = \mathcal{E}(a,b') = \mathcal{E}(a',b') = -\mathcal{E}(a',b) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

ce qui donne

$$S = \frac{-4}{\sqrt{2}} = -2\sqrt{2} \leq -2$$

Les inégalités de Bell sont violées : il n'y a pas de variables cachées.

Annexes

Exercices : Outils mathématiques

Exercice .1. Matrices de Pauli

On définit les matrices

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$
$$\sigma_z = \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

appelées matrices de Pauli. Elles jouent un rôle très important dans la description du comportement quantique du spin de l'électron et plus généralement de tous les systèmes quantiquesà deux niveaux. On se propose de vérifier quelques-unes de leurs propriétés souvent utilisées en mécanique quantique.

1. Vérifier que $\sigma_i^2 = I$.
2. Le commutateur $[A, B]$ de deux matrices est $[A, B] = AB - BA$. Vérifier que $[\sigma_i, \sigma_i] = 0$.
3. Vérifier que, pour $i \neq j$, $\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$ [1].
4. Montrer que $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$, si $i \neq j$.
5. L'anticommuntateur $\{A, B\}$ de deux matrices est $\{A, B\} = AB + BA$. Vérifier que $\{\sigma_i, \sigma_i\} = 2I$.
6. On peut définir l'exponentielle d'une matrice A par son développement de Taylor en puissance de A

$$\exp(i\lambda A) = 1 + i\lambda A + \frac{(i\lambda A)^2}{2!} + \cdots$$

où λ est une constante arbitraire. Vérifier que

$$\exp(i\alpha\sigma_x) = I\cos\alpha + i\sigma_x \sin\alpha$$

1. On a bien

$$\sigma_i^2 = I$$

1. ε_{ijk} est le symbole de Levi–Civita et

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

2. On a
$$[\sigma_i, \sigma_i] = 0$$
3. On a
$$\sigma_i \sigma_j = i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$$
4. On a
$$\begin{aligned}[\sigma_i, \sigma_j] &= \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i \\ &= i\varepsilon_{ijk}\sigma_k - i\varepsilon_{jik}\sigma_k \\ &= 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\end{aligned}$$
5. On a
$$\{\sigma_i, \sigma_i\} = 2I$$
6.
$$\begin{aligned}\{\sigma_i, \sigma_j\} &= \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i \\ &= i\varepsilon_{ijk}\sigma_k + i\varepsilon_{jik}\sigma_k \\ &= 0\end{aligned}$$
7. On a
$$\begin{aligned}\exp(i\alpha\sigma_x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\alpha\sigma_x)^k}{k!} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\alpha^{2k}}{(2k)!}\, I + \sum_{k=0}^{\infty} i(-1)^k \frac{\alpha^{2k+1}}{(2k+1)!}\, \sigma_x \\ &= I\cos\alpha + i\sigma_x \sin\alpha\end{aligned}$$

Exercice .2. Matrices hermitiques, unitaires

Soit une matrice $A = (a_{ij})$, alors son hermitique est définie par
$$a_{ij}^\dagger = (a_{ij}^t)^* = a_{ij}^*$$
1. On a
$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i$$

Index

Table des matières