

# Introduction à la mécanique quantique

Fabien Besnard

February 6, 2013

<b>La physique classique ou le triomphe du mécanisme</b>	<b>3</b>
La fin de la physique ? . . . . .	4
Quelques mystères demeurent. . . . .	5
<b>La période de fermentation : 1900–1923</b>	<b>6</b>
Le corps noir (1) . . . . .	7
Le corps noir (2) . . . . .	8
Le corps noir (3) . . . . .	9
L'effet photoélectrique . . . . .	10
Les quanta de lumière d'Einstein . . . . .	11
Structure de l'atome (1) . . . . .	12
Structure de l'atome (2) . . . . .	13
Structure de l'atome (3) . . . . .	14
Structure de l'atome (4) . . . . .	15
Le modèle de Bohr (1) . . . . .	16
Modèle de Bohr (2) . . . . .	17
Limites du modèle de Bohr . . . . .	18
<b>La transition</b>	<b>19</b>
Les ondes de matière. . . . .	20
La mécanique ondulatoire (1) . . . . .	21
La mécanique ondulatoire (2) . . . . .	22
Fentes d'Young (1) . . . . .	23
Fentes d'Young (2) . . . . .	24
Fentes d'Young (3) . . . . .	25
Fentes d'Young (4) . . . . .	26
Fentes d'Young (5) . . . . .	27
La mécanique des matrices (1) . . . . .	28
La mécanique des matrices (2) . . . . .	29
La fusion des deux nouvelles mécaniques . . . . .	30
Méca. analytique (1) . . . . .	31
Méca. analytique (2) . . . . .	32
Commutateurs et crochets de Poisson . . . . .	33
<b>Postulats de la MQ</b>	<b>34</b>
bras et kets. . . . .	35
Opérateurs (1) . . . . .	36
Opérateurs (2) . . . . .	37
Premier postulat. . . . .	38
Deuxième postulat . . . . .	39
Postulats 3 et 4 . . . . .	40
Cinquième postulat . . . . .	41
Sixième postulat. . . . .	43
Réduction du paquet d'onde . . . . .	45

<b>Applications des postulats</b>	<b>46</b>
Espérance et écart-type . . . . .	47
Exemple : l'ion $H_2^+$ . . . . .	48
Relations d'incertitude . . . . .	49
Stabilité de la matière. . . . .	50
Le théorème d'Ehrenfest . . . . .	51
Effet tunnel. . . . .	52
Effet tunnel (2) . . . . .	53
<b>Moment cinétique et spin</b>	<b>54</b>
Moment cinétique : définition . . . . .	55
Moment cinétique : représentations. . . . .	56
Moment cinétique orbital . . . . .	57
Application à l'atome d'hydrogène. . . . .	58
Existence du spin (1) . . . . .	59
Existence du spin (2) . . . . .	60
Existence du spin (3) . . . . .	61
Algèbre du spin $1/2$ . . . . .	62
Spin et statistique (1) . . . . .	63
Spin et statistique (2) . . . . .	64
<b>Paradoxes et Interprétations</b>	<b>65</b>
"Paradoxe du chat" (1) . . . . .	66
Paradoxe du chat (2) . . . . .	67
Intrication (1) . . . . .	68
Intrication (2) . . . . .	69
Intrication (3) . . . . .	70
<b>Conclusion</b>	<b>71</b>
Et après ? . . . . .	72
Et encore après. . . . .	73

## Table des matières

La physique classique ou le triomphe du mécanisme

La période de fermentation : 1900–1923

La transition

Postulats de la MQ

Applications des postulats

Moment cinétique et spin

Paradoxes et Interprétations

Conclusion

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 2 / 74

## La physique classique ou le triomphe du mécanisme

3 / 74

### La fin de la physique ?

Fin XIX<sup>e</sup>: matière (charges et masses) + 2 forces sur le même modèle.

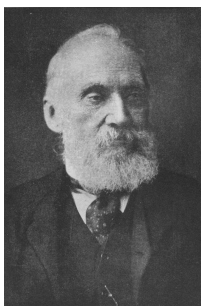
Matière faite d'atomes.

Éther remplit tout l'espace (atomique ou continu ?).

Ondes dans l'éther = lumière.

Chaleur = agitation moléculaire.

On a (presque) tout compris !



*“The beauty and clearness of the dynamical theory, which asserts heat and light to be modes of motion, is at present obscured by two clouds. The first came into existence with the undulatory theory of light [ . . . ] It involved the question “How could Earth move through an elastic solid, such as essentially is the luminiferous ether ?” The second is the Maxwell-Boltzmann current doctrine regarding the partition of energy.”*  
William Thomson (Lord Kelvin), 1900

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 4 / 74

## Quelques mystères demeurent...

1. Éther (autre histoire...)
2. Tableau périodique des éléments (Mendeleïev, 1869) → pas d'explication.
3. Spectres atomiques (formule de Balmer, 1885) → pas d'explication.
4. Structure de l'atome (découverte de l'électron, J.J. Thomson, 1899)
5. Radioactivité (Becquerel, 1896)
6. Problème du corps noir.

Rien de tout cela ne paraît bien grave...

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 5 / 74

## La période de fermentation : 1900–1923

6 / 74

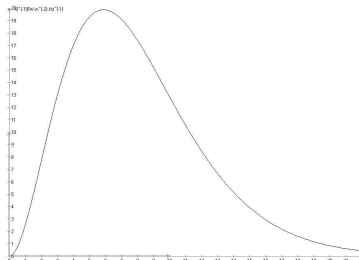
### Le corps noir et l'hypothèse de Planck (1)

Un corps rayonne en fonction de sa température.

Corps noir : seule source de rayonnement = agitation thermique.

Modèle de corps noir : four percé d'un trou.

Densité de puissance émise / unité de surface en fonction de  $\nu$  :



1. Forme "en cloche" → dispersion des énergies cinétiques autour de la moyenne (température)
2. Maximum se déplace avec la température. (loi de Wien)
3. Comment retrouver cette courbe par la théorie ?

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 7 / 74

## Le corps noir et l'hypothèse de Planck (2)

1. Théorème d'équipartition : à l'équilibre thermique, chaque degré de liberté contribue pour  $\frac{1}{2}kT$  à l'énergie totale.
2. Théorie de l'E.M. : nbre de modes d'oscillation du champ dans  $[\nu; \nu + d\nu] \propto \nu^2 d\nu \rightarrow +\infty !$
3. E.M.+ physique statistique = catastrophe ultraviolette !



Hypothèse de calcul (Planck, 1900) : échanges d'énergie matière-rayonnement uniquement par "quanta" de valeur  $h\nu$ .

$$\Rightarrow M_\nu^0(\nu, T) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (\text{Loi de Planck, 1900})$$

où  $M_\nu^0$  =exitance, en  $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{Hz}^{-1}$ .

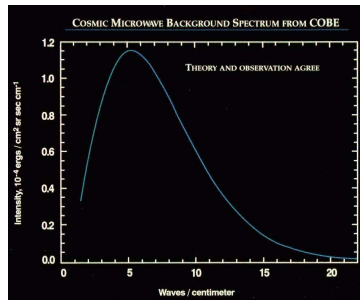
Colle parfaitement aux données avec  $h \simeq 6,626 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$ , cte universelle.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 8 / 74

## Le corps noir et l'hypothèse de Planck (3)

Plus belle confirmation : fond diffus cosmologique = rayonnement de corps noir à 2,725 K.



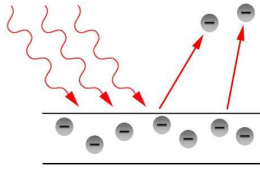
Planck voit son hypothèse comme un artifice de calcul.

Einstein est plus audacieux. . .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 9 / 74

## L'effet photoélectrique



Production de courant par certains métaux exposés à lumière UV. Découvert par Hertz (1887).

1.  $\nu \nearrow \Rightarrow E_c \nearrow$ .
2.  $\exists$  un seuil  $\nu_0$  tq  $\nu < \nu_0 \Rightarrow$  aucun effet.
3.  $\nu > \nu_0 \Rightarrow$  réponse immédiate : pas d'accumulation dans un réservoir.
4.  $I_{\text{courant}}$  dépend de  $I_{\text{lumière}}$ , mais...
5.  $E_c$  indépendante de  $I_{\text{lumière}}$ .

Effet discontinu (seuil, tout ou rien,...). Comment l'expliquer avec ondes lumineuses continues ?

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 10 / 74

## Les quanta de lumière d'Einstein

Einstein (1905) : Si lumière faite de particules d'énergie  $h\nu$ , alors explique effet photoélectrique :

Si  $\nu \nearrow$ , chocs avec photons plus énergétiques  $\Rightarrow e^-$  plus rapides.

Pas d'effet si énergie photon  $<$  énergie de liaison  $W$ .

$I_{\text{lumière}} \nearrow \Rightarrow$  + de photons, donc + d' $e^-$  émis, mais tous de m $\hat{m}$   $E_c$ .

Prédiction :  $E_c = h\nu - W$ .



*This hypothesis may well be called reckless [...] because it flies in the face of the thoroughly established facts of interference.* (R.A. Millikan, 1916)

Millikan veut détruire ces inepties : expériences (1912–1917)...

La relation d'Einstein est vérifiée !

*Despite the apparent complete success of the Einstein equation, the physical theory of which it was designed to be the symbolic expression is found so untenable that Einstein himself, I believe, no longer holds to it.* (R.A. Millikan, 1916)

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 11 / 74

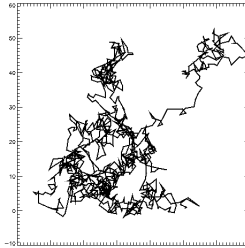
## Structure de l'atome (1)

Atomes :

- hypothèse de philosophie naturelle (Leucippe, Démocrite, -400)
- hypothèse de chimie (Dalton, 1808).

Confirmations : stéréochimie, théorie cinétique des gaz.

Einstein (1905) : théorie du mouvement Brownien.



*Les atomes*, J. Perrin, 1913 : recense 13 confirmations indépendantes.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 12 / 74

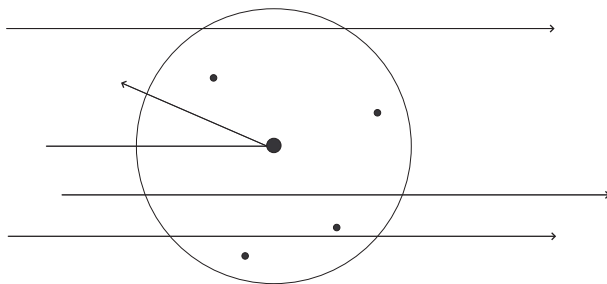
## Structure de l'atome (2)

J.J. Thomson (1897) : rayons cathodiques = corpuscules négativement chargés.

H. Becquerel (1900) : rayons bêta (radium) = rayons cathodiques.

→ atomes contiennent des particules – (électrons) et + (?)

E. Rutherford (1909) : envoie des particules alpha sur des feuilles d'or.



Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 13 / 74

### Structure de l'atome (3)

Modèle de Rutherford :



L'électron accélère donc rayonne. Donc perd de l'énergie.

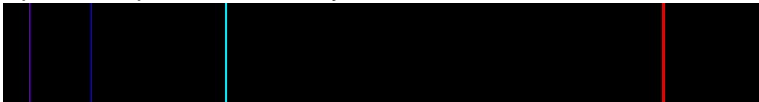
→ durée de vie  $\sim 10^{-8}\text{s}$  !

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 14 / 74

### Structure de l'atome (4)

Spectroscopie : la clef du mystère ?



Raies spectrales connues début XIX<sup>e</sup>. Faits :

1. Spectres discrets (bizarre !)
2. Balmer (1885), puis Rydberg ( $\sim 1900$ ), formule empirique pour l'H :

$$\nu = R_H \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

3. Formule ne marche que pour ion à un seul  $e^-$ , mais dans tous les cas  $\exists$  un principe de combinaison.

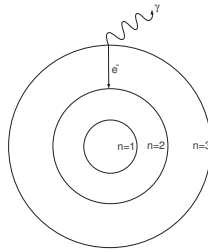
Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 15 / 74



## Le modèle de Bohr (1)

Modèle de Bohr (1913) : seules certaines orbites d'énergie bien précises sont autorisées pour l' $e^-$  (hypothèse ad hoc).



Fréquence spectre émission :  $h\nu_{ij} = E_i - E_j$ .

Pour retrouver Balmer/Rydberg on suppose  $E_n = -h\frac{R}{n^2}$ ,  $i \in \mathbb{N}^*$ .

Or énergie mécanique d'un  $e^-$  en orbite circulaire autour d'un  $p^+$  :

$$E(r) = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \Rightarrow r(n) = \frac{e^2 n^2}{8\pi\epsilon_0 h R}$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 16 / 74

## Modèle de Bohr (2)

Application du PFD donne fréquence de l' $e^-$  :

$$\nu(n) = \frac{e}{4\sqrt{m_e \pi^3 \epsilon_0} r(n)^3} = \frac{4\sqrt{2}\epsilon_0 R^{3/2} h^{3/2}}{n^3 e^2 m_e^{1/2}} \quad (1)$$

Pour  $n$  grand,  $\nu_{n+1,n} = \frac{1}{h}(E_{n+1} - E_n) \approx \nu(n)$ . Or

$$E_n = -h\frac{R}{n^2} \Rightarrow \frac{1}{h}(E_{n+1} - E_n) \approx \frac{2R}{n^3} \text{ pour } n \text{ grand} \quad (2)$$

En comparant (2) et (1) on trouve

$$R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3}$$

En accord avec la valeur expérimentale ! On trouve aussi :

$$r(1) := a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} \approx 5,3 \times 10^{-11} \text{ m} \approx 0,53 \text{ \AA} \text{ et } E_1 = -hR = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \approx -13,6 \text{ eV}$$

Expérience de Frank-Hertz (1914) : confirme directement que l'énergie des atomes est quantifiée.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 17 / 74

## Limites du modèle de Bohr

1. Ne marche pas pour les atomes et ion à 2 électrons ou plus.
2. Même pour l'H, n'explique pas tout : structure fine, effet Zeeman, ...
3. Pas d'explication pour la quantification de l'énergie (ou du moment cinétique).

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 18 / 74

## La transition vers une nouvelle mécanique : 1923–1926

19 / 74

### Les “ondes de matière” de Louis de Broglie

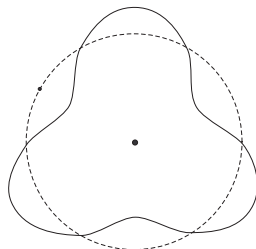
→ Dualité onde/corpuscule pour la lumière.

de Broglie (1924) : propose une dualité onde/corpuscule pour la matière !

À toute particule d'énergie  $E$  et d'impulsion  $\vec{p}$  est associée une onde de fréquence  $\nu$  telle que  $E = h\nu$ , et de vecteur d'onde  $\vec{k}$  tel que  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ .

Justifie le modèle de Bohr :  
orbites autorisée  $\leftrightarrow$  ondes  
stationnaires

$$\phi = \oint \vec{k} \cdot d\vec{r} = 2\pi n \Leftrightarrow$$
$$\oint \vec{p} \cdot d\vec{r} = n\hbar$$



*Cette hypothèse [...] vaut, comme toutes les hypothèses, ce que valent les conséquences qu'on peut en déduire.*

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 20 / 74

## La mécanique ondulatoire (1)

Accueil mitigé.

Einstein est emballé → convainc Schrödinger de s'y intéresser.

Prédiction expérimentale : diffraction des électrons par un réseau (sera observé par Davisson et Germer en 1927).

Deux grandes questions à propos des ondes de matière :

1. Quelle est leur équation ?
2. Quelle est leur interprétation ?

particule libre → onde plane du type  $\Psi(\vec{r}, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)}$

$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = E\Psi \text{ et } -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi = \frac{p^2}{2m} \Psi$$

Compte tenu de  $E = E_c = \frac{p^2}{2m}$  on obtient

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

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 21 / 74

## La mécanique ondulatoire (2)

Dans un potentiel  $V(\vec{r})$  on a  $E = E_c + V(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$ , d'où :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi \quad (3)$$

⚡ On a juste trouvé une équation dont  $\Psi$  est la solution. Il y en a bien d'autres !

L'équation de Schrödinger est un postulat.

Justifications (a posteriori) : ça marche bien !

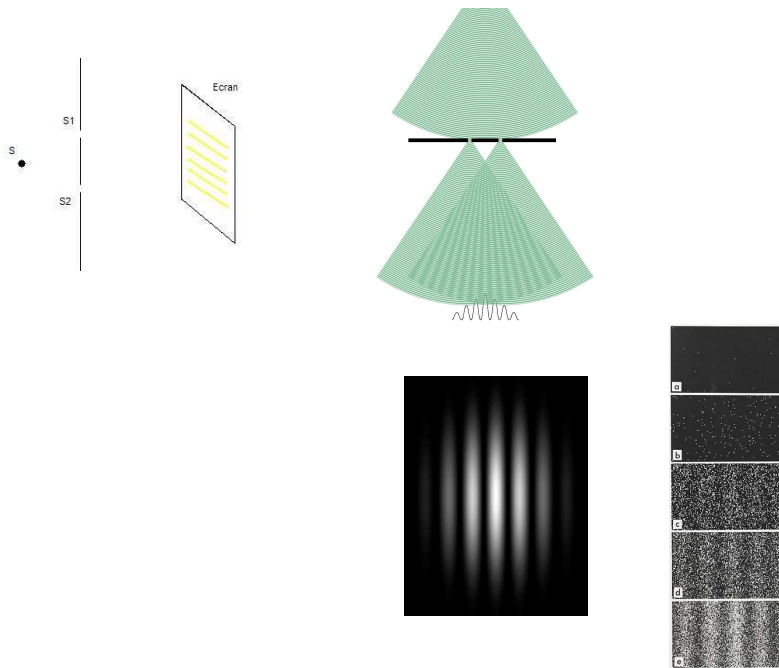
Premières observations :

1. Équation linéaire.
2. 1er ordre en  $t$  → on peut déterminer  $\Psi(t)$  connaissant  $\Psi(t_0)$ .
3. Elle est complexe.
4. Si on pose  $\rho = \Psi\Psi^* = |\Psi|^2$  et  $\vec{j} = \frac{\hbar}{2im}(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*)$ , alors (3) ⇒  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$ , forme locale d'une éq de conservation.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 22 / 74

## Expérience des fentes d'Young (1)



Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 23 / 74

## Expérience des fentes d'Young (2)

Résumé :

1. Si  $I_{lum} \searrow$ , le temps d'exposition pour voir les franges  $\nearrow$  (Expérience de G.I. Taylor, 1909).
2. Les taches apparaissent de façon aléatoire.
3. Les taches ne s'élargissent pas quand on recule l'écran.

Interprétation en terme de photons :

$I_{lum}$  reçue dans  $[x; x + dx] \propto$  nombre de photons  $N(x)$  reçus dans cet intervalle.  
Soit  $f(x) = N(x)/N$ . Si  $N$  grand, loi des grands nombres  $\Rightarrow f(x) \rightarrow P(x)$ . Donc :

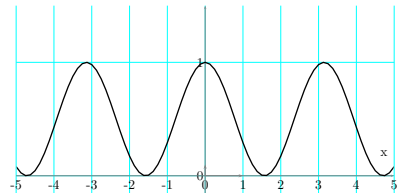
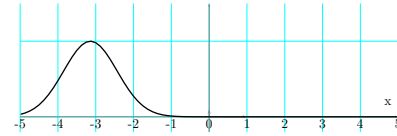
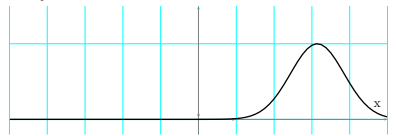
$$I(x) \propto P(x)$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 24 / 74

### Expérience des fentes d'Young (3)

Expérience avec un trou bouché :



$$P(x) \neq P_1(x) + P_2(x) !$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 25 / 74

1

### Expérience des fentes d'Young (4)

Résumé :

1. Formation par taches aléatoires : incompatible avec la théorie ondulatoire.
2. Interférences : incompatible avec la théorie corpusculaire.
3. C'est pareil avec des électrons (Davisson-Germer, 1927), des atomes (Carnal-Mlynek 1991), des molécules (Arndt et al, 1999)...

Bohr : dualité onde/corpuscule → obsolète.

Les "quants" ne sont ni des ondes ni des particules.  
Il n'existe pas d'onde. Il n'existe pas de particules. Il n'existe que des quants.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 26 / 74

## Expérience des fentes d'Young (5)

Physique ondulatoire classique :  $I = |h|^2$  avec  $h$  amplitude complexe du type  $h = Ae^{i\omega t}$ .

$$h = h_1 + h_2 \Rightarrow I = |h_1 + h_2|^2$$

Or  $I(x) \propto P(x)$  + ondes de matière  $\Psi$  s'additionnent (eq. de Schrödinger linéaire).

Born (1926) :  $P(x) \propto |\Psi(x)|^2$ .

$$P(x) \propto |\Psi(x)|^2 = |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \neq |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 \propto P_1(x) + P_2(x)$$

$2\text{Re}(\Psi_1 \bar{\Psi}_2)$  = terme d'interférence.

⚡ Si on met un détecteur pour voir par quel trou est passé la particule, on détruit le terme d'interférence !

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 27 / 74

## La mécanique des matrices (1)



Heisenberg : la trajectoire d'un électron est inobservable par principe.

Microscope de Heisenberg : précision de l'ordre de  $\Delta x \Rightarrow$  longueur d'onde du photon  $\lambda \sim \Delta x$ .

Qtité de mvt du photon  $p = h/\lambda \Rightarrow$  qtité de mvt de la particule modifiée de  $\Delta p_x \sim h/\lambda$ .

$$\Rightarrow \Delta x \Delta p_x \sim h$$

→ Refaire la théorie de l'atome d'H en se débarrassant des trajectoires de l' $e^-$ .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 28 / 74

## La mécanique des matrices (2)

H. développe la position sur un axe de l' $e^-$  en série de F. :

$$q(t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} q_k e^{i\omega_k t} \text{ où } \omega_k = 2k\pi/T$$

car modes de Fourier  $\rightarrow$  fréquences spectrales (observables).

$n$ -ième orbite de Bohr :  $q_n(t) \rightarrow \sum_k q_{n,k} e^{i\omega_{n,k} t}$ , où  $\omega_{n,k} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_k)$ .

$q_n(t)$  représentée par  $(Q_{n,k})$ , avec  $Q_{n,k} = q_{n,k} e^{i\omega_{n,k} t}$ .

Question : qu'est-ce qui représente  $q_n(t)^2$  ?

$$Q_{n,k}^{(2)} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} Q_{n,m} Q_{m,k}$$

Produit de matrices !

On trouve aussi que

$$QP - PQ = \hbar \text{Id}$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 29 / 74

## La fusion des deux nouvelles mécaniques

Deux théories complètement différentes qui donnent le même résultat !



Dirac : passage MC  $\rightarrow$  MQ = passage  $c$ -nombres  
 $\rightarrow$   $q$ -nombres.

Méca Matrices/Méca Ondulatoire : deux représentations différentes des  $q$ -nombres :

- $Q, P$  matrices telles que  $QP - PQ = \hbar \text{Id}$
- opérateurs agissant sur des fonctions :  $\hat{q} =$  multiplication par  $x$ ,  $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ . Vérifient  $\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q} = \hbar \text{Id}$ .

Analogie mécanique hamiltonienne/mécanique quantique.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 30 / 74

## Mécanique analytique (1)

On cherche  $t \mapsto \gamma(t)$  vérifiant

$$\gamma(t_i) = M_i \text{ et } \gamma(t_f) = M_f$$

On définit l'action

$$S(\gamma) = \int_{t_i}^{t_f} \mathcal{L}(\gamma(t), \dot{\gamma}(t), t) dt$$

$\mathcal{L}$  = lagrangien. Pour une particule dans un potentiel :

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}, t) = \frac{1}{2} m \|\dot{q}\|^2 - V(q, t)$$

où  $q = (x_1, x_2, x_3)$ .

Principe de moindre action :  $\delta S(\gamma) = 0$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) \text{ (équations d'Euler-Lagrange)}$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 31 / 74

## Mécanique analytique (2)

moment conjugué :  $p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}$

Hamiltonien :  $H(q, p, t) := \sum_i p_i \dot{q}_i(q, p) - \mathcal{L}(q, p, t)$

crochet de Poisson :

$$\{f, g\} := \sum_i \left( \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$$

$$\Rightarrow \{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0; \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

et

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 32 / 74



## Commutateurs et crochets de Poisson

Dirac remarque l'analogie :

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0; \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$
$$\rightarrow [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0; [\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

$$\{ , \} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [ , ]$$

Permet souvent de "quantifier" un système classique.

Exemple : particule dans un potentiel :  $H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$

Hamiltonien quantique (hypothèse) :  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$ .

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi$$

Forme générale de l'éq. de S.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 33 / 74

## Postulats de la mécanique quantique

34 / 74

### Rappels de maths (1) : bras et kets

$V = \mathbb{C}$ -espace vectoriel +  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  tq :

1.  $\langle \lambda v, w \rangle = \bar{\lambda} \langle v, w \rangle$  et  $\langle v, \lambda w \rangle = \lambda \langle v, w \rangle$ ,
2.  $\langle u + v, w \rangle = \langle u, w \rangle + \langle v, w \rangle$ ,
3.  $\langle v, w \rangle = \overline{\langle w, v \rangle}$ ,
4.  $\langle v, v \rangle \in \mathbb{R}^+$ ,
5.  $\langle v, v \rangle = 0 \Rightarrow v = 0$ .

Espace de Hilbert =  $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$  et complet.

$\epsilon : V \rightarrow V^*$  définie par  $\epsilon(v) = \langle v, \cdot \rangle$ .

Notations de Dirac : ket  $|v\rangle \in V$ , bra  $\langle v| := \langle v| \in V^*$

$$\langle v|w\rangle = \epsilon(v)(w) = \langle v, |w\rangle$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 35 / 74

## Rappels de maths (2) : opérateurs

opérateur = endomorphisme de  $V$ .

Notations des physiciens :  $f(v) \rightarrow f|v\rangle$ .

$O$  opérateur. Adjoint  $O^*$  défini par :

$$\forall |u\rangle, |v\rangle \langle |u\rangle, O|v\rangle \rangle = \langle O^*|u\rangle, |v\rangle \rangle := \langle u|O|v\rangle$$

Conventions  $O$  agit sur  $\langle u|$  par  $\langle u|O = \epsilon(O^*|u\rangle)$ .

$O$  est :

- *hermitien* ssi  $O = O^*$ ,  $\Rightarrow \sigma(O) \subset \mathbb{R}$
- *antihermitien* ssi  $O = -O^*$ ,  $\Rightarrow \sigma(O) \subset i\mathbb{R}$
- *unitaire* ssi  $OO^* = O^*O = \text{Id}_V$ ,  $f \Rightarrow \sigma(O) \subset S^1$ ,
- *normal* ssi  $OO^* = O^*O$ .

**théorème spectral** : Si  $V$  de dimension finie et  $f : V \rightarrow V$  est normal, alors  $\exists$  une BON de vecteurs propres pour  $f$

**Codiagonalisation** :  $a, b$  diagonalisables + commutent  $\Leftrightarrow a$  et  $b$  codiagonalisables.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 36 / 74

## Rappels de maths (3) : norme et exponentielle d'opérateurs

$$\|a\|_\infty := \sup_{v \in V \setminus \{0\}} \frac{\|a(v)\|}{\|v\|}$$

$\|a\| < +\infty \Leftrightarrow a$  borné  $\Leftrightarrow a$  continu.

$\mathcal{B}(V)$  = opérateurs bornés.  $(\mathcal{B}(V), \|\cdot\|_\infty)$  evnc, stable par  $\circ$  et  $*$ , et

- $\|a\| = \|a^*\|$ ,
- $\|a \circ b\| \leq \|a\| \times \|b\|$

**Théorème** :  $\forall a \in \mathcal{B}(V)$ ,  $s_n(a) := \sum_{i=0}^n \frac{a^i}{i!}$  CV.  $\lim s_n(a) := \exp(a)$ .

Si  $a$  et  $b$  commutent, alors  $\exp(a+b) = \exp(a)\exp(b) = \exp(b)\exp(a)$ .

$\Rightarrow \exp(a)\exp(-a) = \exp(-a)\exp(a) = \exp(0) = \text{Id}$ .

Autre propriétés :

- $\exp(a^*) = \exp(a)^*$ .
- $a$  antihermitien  $\Rightarrow \exp(a)$  unitaire.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 37 / 74

## Premier postulat

**Postulat 1** À tout système physique correspond un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$ , appelé *l'espace des états*.

- À plusieurs systèmes peuvent correspondre le même espace des états.
- En pratique on sait faire si le système est assez simple.
- On ne sait pas encore faire avec certitude pour la gravitation (gravité quantique).

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 38 / 74

## Deuxième postulat

**Postulat 2** À chaque instant  $t$ , l'état d'un système physique est décrit par un vecteur non nul  $|\psi(t)\rangle$  de l'espace des états, appelé *vecteur d'état*. Deux vecteurs non nuls représentent le même état si, et seulement si, ils sont proportionnels.

- Ce sont les droites de  $\mathcal{H}$  qui représentent vraiment les états.
- Temps = paramètre extérieur, absolu  $\rightarrow$  incompatible avec RR. OK si vitesses  $\ll c$ .
- Ici "point de vue de Schrödinger."
- Postulats 1 et 2  $\rightarrow$   $\mathbb{C}$ -linéarité : si  $|\psi(t)\rangle, |\phi(t)\rangle$  vecteurs d'états  $\forall c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ ,  $c_1|\psi(t)\rangle + c_2|\phi(t)\rangle$  vecteur d'état (sauf si = 0).

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 39 / 74

### Troisième et quatrième postulats

**Postulat 3** À chaque propriété observable d'un système physique correspond un opérateur hermitien sur l'espace des états. Un tel opérateur s'appelle *une observable*.

- Exemples : énergie, projection sur un axe de l'impulsion ou position ou moment cinétique d'une particule, etc. . .
- Pas de recette pour savoir quel opérateur prendre : postulats indépendants dans chaque cas.

**Postulat 4** Les résultats possibles de la mesure d'une variable sont les valeurs propres de l'observable correspondante.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 40 / 74

### Cinquième postulat

$a$  variable,  $A$  obs. associée,  $\alpha$  vp de  $A$ ,  $|\psi\rangle$  vecteur d'état normalisé.

Si  $\alpha$  est simple :

$$P(a \rightarrow \alpha|\psi) = |\langle \alpha|\psi\rangle|^2$$

où  $|\alpha\rangle$  vp normalisé associé à  $\alpha$ .

Si  $|\psi\rangle$  et  $|\alpha\rangle$  non normalisés :  $P(a \rightarrow \alpha|\psi) = \frac{|\langle \alpha|\psi\rangle|^2}{\langle \alpha|\alpha\rangle\langle \psi|\psi\rangle}$

Si  $\alpha$  de multiplicité  $m < \infty$  et  $|\alpha^1\rangle, \dots, |\alpha^m\rangle$  BON de l'esp. propre  $E_\alpha$  :

**Postulat 5** La probabilité qu'une mesure de  $a$  donne le résultat  $\alpha$  lorsque le système est dans l'état  $|\psi\rangle$  est :

$$P(a \rightarrow \alpha|\psi) = \sum_{j=1}^m \frac{|\langle \alpha^j|\psi\rangle|^2}{\|\psi\|^2}$$

Plus généralement, si  $\pi = \text{proj. } \perp$  sur  $E_\alpha$ , on a :

$$P(a \rightarrow \alpha|\psi) = \frac{\|\pi|\psi\rangle\|^2}{\|\psi\|^2}$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 41 / 74

### Exemple :

$\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$  + p.h. canonique.  $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle = \text{b.c.}$   
Observable  $O$  représentée dans la b.c. par :

$$O = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ -i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Quel est le spectre de  $O$  ? Réponse :  $\sigma(O) = \{-\sqrt{2}; 0; \sqrt{2}\}$ .

Trouver une BON de v.p.

Réponse possible :  $|\sqrt{2}\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \\ 1/2 \end{pmatrix}, |0\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, |-\sqrt{2}\rangle = \begin{pmatrix} -1/2 \\ i/\sqrt{2} \\ -1/2 \end{pmatrix}$ .

Soit  $|\psi\rangle = \sqrt{2}|1\rangle - 2i|2\rangle + \sqrt{2}|3\rangle$ . Que donne une mesure de  $o$  si le système est dans l'état  $|\psi\rangle$  ?

Réponse : on a  $|\psi\rangle = -2\sqrt{2}|\sqrt{2}\rangle$ . Il est donc certain que le résultat est  $\sqrt{2}$

Quelles sont les probas des résultats possibles d'une mesure de  $o$  lorsque le système est dans l'état  $|\psi'\rangle = |1\rangle$  ?

$P(o \rightarrow \sqrt{2}) = |\langle \sqrt{2} | 1 \rangle|^2 = |(-1/2)|^2 = 1/4, P(o \rightarrow 0) = 1/2, P(o \rightarrow -\sqrt{2}) = 1/4.$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 42 / 74

### Sixième postulat

**Postulat 6** Soit  $H$  le hamiltonien d'un système et  $|\psi(t)\rangle$  son vecteur d'état à l'instant  $t$ . Alors, en l'absence de toute opération de mesure,  $|\psi(t)\rangle$  satisfait l'éq. d'évolution de Schrödinger :

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

- $H$  dépend de  $t$  si le système n'est pas isolé.
- L'évolution de  $|\psi(t)\rangle$  est déterministe tant qu'il n'y a pas de mesure.
- Si  $H$  ne dépend pas de  $t$ , l'éq. de S. s'intègre en

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \text{ où } U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$$

$U(t, t_0)$  = opérateur d'évolution.  $H$  hermitien  $\Rightarrow U$  unitaire

$$\Rightarrow \langle \phi(t) | \psi(t) \rangle = \langle U(t, t_0) \phi(t_0) | U(t, t_0) \psi(t_0) \rangle = \langle \phi(t_0) | U(t, t_0)^{-1} U(t, t_0) \psi(t_0) \rangle = \langle \phi(t_0) | \psi(t_0) \rangle$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 43 / 74

### Exercice : états stationnaires

Montrer que si un système est dans un état d'énergie bien définie, alors il n'évolue pas.

Solution : Soit  $|\psi(t_0)\rangle$  un état propre de  $H$  associé à la v.p.  $E$ .

Alors  $\forall t > t_0$ , on a :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E}|\psi(t_0)\rangle$$

Comme  $|\psi(t)\rangle \propto |\psi(t_0)\rangle$ , ils représentent le même état.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 44 / 74

### Réduction du paquet d'onde

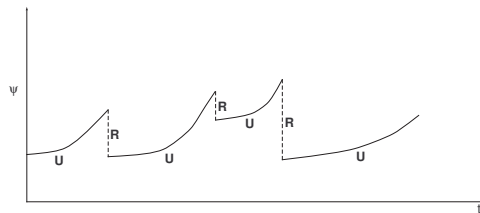
**Hypothèse** Soit  $a$  une variable,  $\alpha$  une valeur propre de l'observable associée, et  $E_\alpha$  le s.e.v propre associé. Alors si on effectue une mesure de  $a$  entre les instants  $t$  et  $t + \epsilon$  sur un système, le vecteur d'état de ce système vérifie :

$$|\psi(t + \epsilon)\rangle = \frac{\pi_\alpha |\psi(t)\rangle}{\|\pi_\alpha |\psi(t)\rangle\|}$$

où  $\pi_\alpha$  est le projecteur  $\perp$  sur  $E_\alpha$ .

→ si on mesure  $a$  juste après l'avoir mesuré une première fois, on retrouve la même valeur.

Succession d'évol. unitaires et de réductions du paquet d'onde :



Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 45 / 74

**Espérance et écart-type d'une variable**

Soit  $\langle A \rangle_\psi$  l'espérance et  $(\Delta A)_\psi$  l'écart-type du résultat d'une mesure d'une certaine variable  $a$  lorsque le système considéré est dans l'état  $|\psi\rangle$ .

Exercice : montrer que :

$$\langle A \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\|\psi\|^2}$$

et

$$(\Delta A)_\psi = \frac{1}{\|\psi\|} (\langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle \psi | A | \psi \rangle^2)^{1/2}$$

**Exemple : l'ion  $H_2^+$**



Système constitué de  $p_1^+$ ,  $p_2^+$  et  $e^-$ . On suppose :

- $d$  constante,
- Deux états pour la position de  $e^-$  :  $H - H^+$  ou  $H^+ - H$ . On les note  $|1\rangle$  et  $|2\rangle$ .

Soit  $X$  l'obs. "position de  $e^-$ ":  $X \leftrightarrow \begin{pmatrix} -d/2 & 0 \\ 0 & d/2 \end{pmatrix}$ .

Énergie ? Hamiltonien  $H \leftrightarrow \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}$ .

Montrer que  $H_{11}, H_{22} \in \mathbb{R}$ ,  $H_{21} = \bar{H}_{12}$ , et  $H_{11} = H_{22}$  !

On pose  $H_{12} = ae^{i\theta}$ ,  $E = H_{11}$ . Montrer que  $\sigma(H) = \{E - a; E + a\}$ .

On suppose  $a \neq 0$ .  $|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\theta}|1\rangle - |2\rangle)$ ,  $|e_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\theta}|1\rangle + |2\rangle)$  sont des vecteurs propres de  $H$ , correspondant resp. à  $E - a$  et  $E + a$ .

Quelle est la proba de trouver  $e^-$  du côté de  $p_1^+$  si l'ion est dans l'état  $|e_1\rangle$  ?

Calculer moy. et écart-type de la position de  $e^-$  dans l'état  $|e_1\rangle$ , puis dans l'état  $|e_2\rangle$ .

## Relations d'incertitude

**Théorème :** Soient  $A, B$  deux observables,  $[A, B] = AB - BA$  leur commutateur, et  $\psi$  un vecteur d'état normalisé. Alors :

$$(\Delta A)_\psi (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle_\psi|$$

Preuve : Cauchy-Schwarz !

Application :

$$\{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \rightarrow [Q_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \Rightarrow \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

De même, tout couple de variables conjuguées  $\rightarrow$  relation d'incertitude.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 49 / 74

## Stabilité de la matière

Argument très heuristique !

Atome d'H.  $R, P$  position/impulsion de l' $e^-$ .

Relations d'incertitude  $\Rightarrow (\Delta R)(\Delta P) \gtrsim \hbar$  en ordre de grandeur.

Symétrie  $\Rightarrow \langle P \rangle = 0 \Rightarrow \langle E_c \rangle = \frac{1}{2m_e} \langle P^2 \rangle = \frac{1}{2m_e} (\Delta P)^2$ .

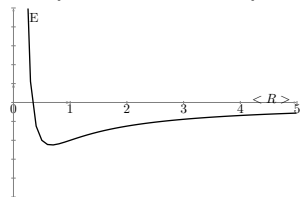
$$\Rightarrow \langle E_c \rangle \sim \frac{\hbar^2}{2m_e (\Delta R)^2} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m_e \langle R \rangle^2}$$

Énergie potentielle :  $V \sim -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \langle R \rangle}$

Énergie totale :

$$E \sim \frac{\hbar^2}{2m_e \langle R \rangle^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 \langle R \rangle}$$

Compétition entre "répulsion de Heisenberg" et attraction coulombienne.



Mimumum =  $-13,6$  eV pour  $\langle R \rangle \simeq 0,53$  Å !

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 50 / 74



## Le théorème d'Ehrenfest

$O$  observable,  $\psi$  un vecteur d'état. On a :

$$\frac{d}{dt}\langle O \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle [O, H] \rangle_\psi \quad (4)$$

Pour une particule dans un potentiel  $V(r)$ ,  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ .

On a

$$[\hat{r}, \hat{p}^2] = 2i\hbar\hat{p}, \text{ et } [\hat{p}, V(\hat{r})] = -i\hbar\nabla V(\hat{r})$$

D'où

$$(4) \Rightarrow \frac{d}{dt}\langle \hat{r} \rangle = \frac{1}{m}\langle \hat{p} \rangle \text{ et } \frac{d}{dt}\langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{r}) \rangle$$

Similaire à :

$$\vec{p} = m\frac{d\vec{r}}{dt}, \text{ et } \frac{d\vec{p}}{dt} = -\nabla V$$

Si on peut faire l'approximation  $\langle V(\hat{r}) \rangle \approx V(\langle \hat{r} \rangle)$

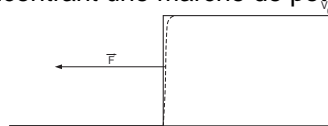
alors on peut dire que la moyenne des observables de position et d'impulsion satisfont les lois de la mécanique classique.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 51 / 74

## Effet tunnel

Classiquement : particule rencontrant une marche de potentiel.



Particule d'énergie bien définie  $E$ ,  $\psi$  sa fonction d'onde.  $\vec{E}$ . de S :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi = E\psi$$

$\psi$  état stationnaire  $\Rightarrow \psi(x, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(x, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\phi(x)$ , d'où

$$\phi'' + \lambda\phi = 0, \text{ avec } \lambda = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$$

Solutions sur un intervalle où  $V$  est constant :

1. Si  $E > V$ , alors  $\lambda > 0$  et  $\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$  où  $k := \sqrt{\lambda}$ ,
2. Si  $E < V$ , alors  $\lambda < 0$ , et  $\phi(x) = Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$  où  $\kappa := \sqrt{-\lambda}$ .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 52 / 74

## Effet tunnel (2)

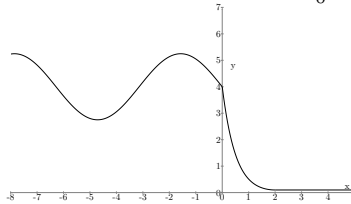
Barrière de potentiel d'extension finie  $l$  et de hauteur  $V_0$ .  
On envoie une particule d'énergie  $0 < E < V_0$  depuis  $-\infty$

3 régions :

- Pour  $x \in ]-\infty; 0[$ ,  $V = 0$ , donc  $\phi(x) = Le^{ikx} + Me^{-ikx}$ ,
- pour  $x \in [0; l]$ ,  $V = V_0 > E$ , donc  $\phi(x) = Ne^{\kappa x} + Pe^{-\kappa x}$ ,
- pour  $x \in ]l; +\infty[$ ,  $V = 0$ , donc  $\phi(x) = Re^{ikx} + Se^{-ikx}$ .

La particule vient de la gauche  $\Rightarrow S = 0$  (pas évident !).

Conditions de recollement  $\Rightarrow$  on tire  $L, M, N, P$  en fonction de  $R, \frac{E}{V_0 - E} \sinh^2(\kappa(x-l))$



Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 53 / 74

## Moment cinétique et spin

54 / 74

### Moment cinétique : définition

Rappel de méca classique  $\rightarrow$  moment cinétique d'une particule par rapport à  $O$  :

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Leftrightarrow L_x = yp_z - zp_y; L_y = zp_x - xp_z; L_z = xp_y - yp_x$$

Quantification :  $x \rightarrow \hat{x}$ ,  $p_x \rightarrow \hat{p}_x$ , etc...

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y; \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z; \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

Vérifient :

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z; [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x; [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \quad (5)$$

Définition : observables de moment cinétique =  $J_x, J_y, J_z$ , vérifiant (5).

2 possibilités :  $J = L$  (moment cinétique *orbital*), ou  $J = S$  (spin).

On pose

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 55 / 74

## Moment cinétique : représentations

On cherche à représenter  $J_x, J_y, J_z$  dans  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ .

Si  $\mathcal{H}$  est une  $\bigoplus$  avec  $J_x, \dots$  agissant indépendamment sur chaque terme, alors la représentation est *réductible*.

On cherche les représentations irréductibles.

**Théorème** Pour tout rep. irréd.,  $\exists j$  de la forme  $j = \frac{n}{2}$ , avec  $n \in \mathbb{N}$ , tel que :

1.  $J^2 = j(j+1)\hbar^2 \text{Id}$ ,

2. Les valeurs propres de  $\frac{1}{\hbar} J_z$  sont les  $2j+1$  nombres :  $-j, -j+1, \dots, j-1, j$ .

En particulier  $\dim(\mathcal{H}) = 2j+1$ .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 56 / 74

## Moment cinétique orbital

On note  $j = \ell$ .  $J_z = \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ . On passe en sphériques :

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$\psi_m$  fonction d'onde propre de  $\hat{L}_z$  ssi

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi = m\hbar \psi$$

$$\Rightarrow \psi_m(r, \theta, \varphi) = \phi_m(r, \theta) e^{im\varphi}$$

Or  $\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) \Rightarrow e^{2im\pi} = 1$ .

$$\Rightarrow m \in \mathbb{N}$$

Or  $m \in \{-\ell; -\ell+1; \dots; \ell-1; \ell\}$ , donc  $\ell \in \mathbb{N}$ .

Que faire des valeurs de  $j$  demi-entières ?

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 57 / 74

## Application à l'atome d'hydrogène.

$e^-$  dans un potentiel central coulombien  $\rightarrow \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)$

$\hat{L}_z$  commute avec la multiplication par  $V(r)$  et  $\Delta \Rightarrow [\hat{L}_z, \hat{H}] = 0$ .

De même  $[\hat{L}_y, \hat{H}] = [\hat{L}_x, \hat{H}] = 0$ , d'où  $[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$ .

$\hat{H}$ ,  $\hat{L}_z$  et  $\hat{L}^2$  commutent entre eux, donc on peut les codiagonaliser.

$\rightarrow$  base d'états propres de la forme  $|n, \ell, m\rangle$  tq

$$\begin{aligned}\hat{H}|n, \ell, m\rangle &= E_n|n, \ell, m\rangle \\ \hat{L}^2|n, \ell, m\rangle &= \ell(\ell+1)\hbar^2|n, \ell, m\rangle \\ \hat{L}_z|n, \ell, m\rangle &= m\hbar|n, \ell, m\rangle\end{aligned}$$

On plonge l'atome dans un champ magnétique constant dirigé selon  $(Oz)$ .  
 $\hat{H} \rightarrow \hat{H}' = \hat{H} - \vec{\mu} \cdot \vec{B}$ , où  $\mu = \gamma_0 \hat{L}$  = moment magnétique.

Quantification  $\rightarrow \hat{H}' = \hat{H} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} = \hat{H} - \gamma_0 \hat{L}_z B$

$$\hat{H}'|n, \ell, m\rangle = (E_n - \gamma_0 B m \hbar)|n, \ell, m\rangle$$

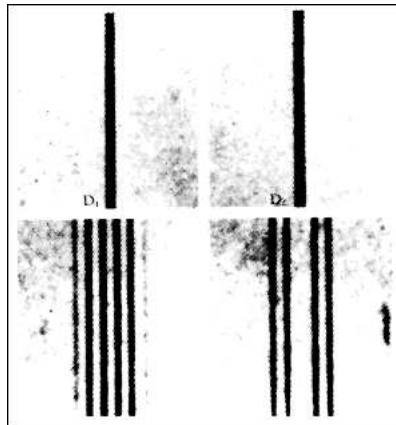
$\rightarrow$  le champ magnétique clive le niveau  $E_n$  en  $2\ell + 1$  sous-niveaux : effet Zeeman.

$\ell \in \mathbb{N} \Rightarrow$  nombre impair de sous-raies.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 58 / 74

## Existence du spin (1)



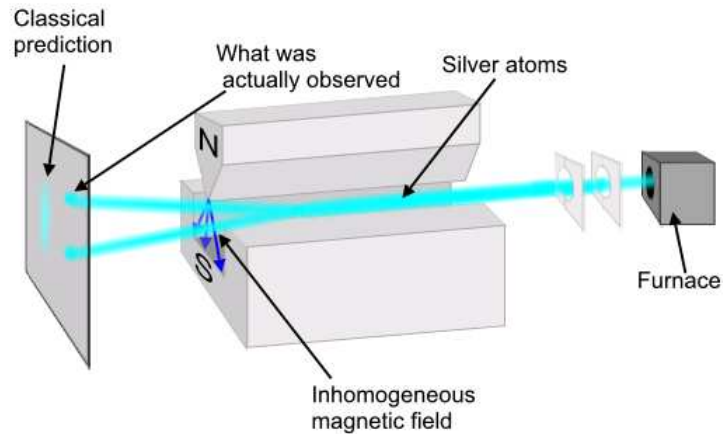
Il peut y avoir un nombre pair de sous-raies !

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 59 / 74

## Existence du spin (2)

Autre énigme : expérience de Stern-Gerlach (1922).



Il peut y avoir un nombre pair de taches ! (2 pour l'atome d'Argent)

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 60 / 74

## Existence du spin (3)

Les deux énigmes s'expliquent si on admet que

1. L'  $e^-$  a un moment magnétique intrinsèque.
2. Ce moment magnétique est  $\propto$  un moment cinétique qui n'est pas de nature orbitale. On l'appelle *spin*.
3. L'électron a un spin  $1/2 \Leftrightarrow$  possède un moment cinétique intrinsèque de valeur  $\sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)}\hbar = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar$ .  
La projection sur un axe ne peut valoir que  $\pm\frac{\hbar}{2}$ .
4. Le moment cinétique d'un atome est la somme du moment cinétique orbital de ses  $e^-$  et de leur spin.

La théorie de Dirac prédit aussi l'existence du spin.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 61 / 74

## Algèbre du spin 1/2

observables  $S_x, S_y, S_z$ , de v.p.  $\pm \frac{\hbar}{2}$ . Dans une base de v.p. de  $S_z$ ,  $S_z \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ . Relations de commutation  $[S_x, S_y] = 2iS_z$ , etc.  $\dots \Rightarrow S_x \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta} \\ e^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix}$ ,  $S_y \leftrightarrow \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -ie^{i\theta} \\ ie^{-i\theta} & 0 \end{pmatrix}$ .

Après changement de phase des vecteurs de base :

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Vecteurs propres normalisés associés aux v.p.  $\pm 1$  de  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  donnés resp. par :

$$|\pm, x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, |\pm, y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}, |+, z\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |- , z\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

**Exo :** Vérifier que si un  $e^-$  est dans l'état  $|+, z\rangle$ , une mesure de son spin selon ( $Ox$ ) donne  $\hbar/2$  avec la proba  $1/2$  et  $-\hbar/2$  avec la proba  $1/2$ .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 62 / 74

## Spin et statistique (1)

En MQ 2 particules identiques (e.g. 2  $e^-$ ) sont *indiscernables*.

pas de trajectoire  $\rightarrow$  on ne peut pas les distinguer par leurs positions.

Soient deux quantons identiques et  $\mathcal{H}$  l'espace des états d'un quanton.

Les états d'un système de deux quantons appartiennent à  $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ .

$$|\psi\rangle = \sum_{k,l} \lambda_{k,l} |k\rangle \otimes |l\rangle$$

Opérateur d'échange  $P : |k\rangle \otimes |l\rangle \mapsto |l\rangle \otimes |k\rangle$ .

Indiscernabilité  $\Rightarrow P|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ ,  $P^2 = \text{Id} \Rightarrow \lambda = \pm 1$ .

Principe de superposition  $\Rightarrow$  même  $\lambda$  pour tous les états.

Si  $P|\psi\rangle = |\psi\rangle$ , on dit que  $|\psi\rangle$  est *symétrique*.

Ex :  $|k\rangle \otimes |k\rangle$ ,  $|k\rangle \otimes |l\rangle + |l\rangle \otimes |k\rangle$ .

Si  $P|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ , on dit que  $|\psi\rangle$  est *antisymétrique*.

Ex :  $|k\rangle \otimes |l\rangle - |l\rangle \otimes |k\rangle$ .

tenseurs symétriques  $\rightarrow$  s.e.v  $\mathcal{S}^2(\mathcal{H})$ , antisym.  $\rightarrow$  s.e.v  $\mathcal{A}^2(\mathcal{H})$

tq  $\mathcal{S}^2(\mathcal{H}) \oplus \mathcal{A}^2(\mathcal{H}) = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}$ .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 63 / 74

## Spin et statistique (2)

Principe de Pauli : fait expérimental, th. de TQC. Admis en MQ.

**Principe de Pauli**  $\exists$  2 types de particules : les bosons et les fermions. Le vecteur d'état d'un système de deux bosons identiques est toujours symétrique. Le vecteur d'état d'un système de deux fermions identiques est toujours antisymétrique. De plus, les particules de spin entier sont des bosons, et les particules de spin demi-entier sont des fermions.

$e^-$ , quarks  $\rightarrow$  fermions; photon, gluons  $\rightarrow$  bosons.

Si  $E \ll$  énergie de liaison, neutrons, protons  $\rightarrow$  fermions,  $\text{He}^{2+} \rightarrow$  boson.

$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle - |\psi_2\rangle \otimes |\psi_1\rangle = 0$  si  $|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle$

$\rightarrow$  principe d'exclusion : 2 fermions indépendants ne peuvent être dans le même état.

De plus,  $n > \dim(\mathcal{H}) \Leftrightarrow \mathcal{A}^n(\mathcal{H}) = \{0\}$ .

$\rightarrow$  explique le tableau périodique des éléments !

Au contraire, les bosons "s'aggrègent" tous dans l'état de plus basse énergie.

Condensation de Bose-Einstein  $\rightarrow$  supraconductivité, superfluidité.

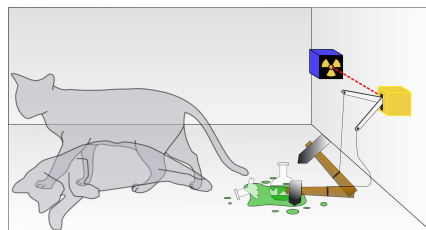
Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 64 / 74

## Paradoxes et Interprétations

65 / 74

### Chat de Schrödinger (1)



Probabilité d'émission au bout d'une heure =  $1/2$  :

$$\begin{aligned} |\psi(1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{particule émise}\rangle + |\text{particule non émise}\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{chat mort}\rangle + |\text{chat vivant}\rangle) \end{aligned}$$

$\rightarrow$  état superposé pour un objet macroscopique.

Interprétation de Copenhague : ouverture de la boîte  $\rightarrow$  projection soit dans l'état  $|\text{mort}\rangle$ , soit dans l'état  $|\text{vivant}\rangle$  (évolution  $R$ , "réduction du paquet d'ondes")

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 66 / 74

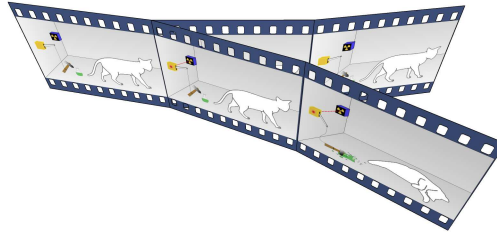
## Chat de Schrödinger (2)

La superposition est contagieuse : boîte + chat + observateur dans une grande boîte  $\Rightarrow$  observateur superposé !

Évolution unitaire de l'état de grande boîte, mais évolution  $R$  de l'état du chat. . .

Et s'il n'y avait pas d'évolution  $R$  ?

1. Interprétation multiverselle (Everett, 1957) : les proba quantiques sont des statistiques !



2. Décohérence : évolution  $U$  + beaucoup de quantons  $\Rightarrow$  évolution  $R$  apparente.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 67 / 74

## Intrication (1)

Einstein, Podolsky, Rosen (1935). Système composé d'un  $e^-$  A et d'un  $e^+$  B. On s'intéresse au spin.

Vecteur d'état :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+, z\rangle \otimes |-, z\rangle - |-, z\rangle \otimes |+, z\rangle) \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}, \mathcal{H} \simeq \mathbb{C}^2$$

$|\Psi\rangle$  possède les propriétés suivantes :

1. La mesure de la projection du spin de A ou B sur un axe quelconque, vaut  $\pm\hbar/2$  avec proba  $1/2 - 1/2$ .
2. Si on mesure le spin de A et B selon le même axe alors les résultats pour A et B sont opposés.
3. Si on mesure le spin de A selon ( $Oz$ ) et le spin de B selon un axe orthogonal ( $Ox$ ), alors il n'y a aucune corrélation entre les résultats.

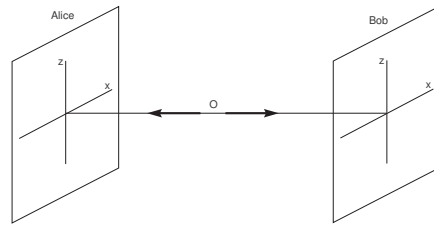
Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 68 / 74



## Intrication (2)

Alice et Bob très loin l'un de l'autre.



Les valeurs de spin ont-elles été déterminées au départ de O ?

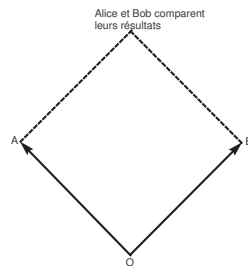
Non, car A et B peuvent attendre le dernier moment pour choisir l'axe de mesure !

Inégalités de Bell (1964). La MQ viole ces inégalités (vérif. expérimentale A. Aspect ~ 1980)

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 69 / 74

## Intrication (3)



Les résultats de A ne disent rien sur B : A et B doivent comparer leurs résultats pour vérifier les corrélations.

L'intrication ne permet pas de transmettre de l'information plus vite que  $c$  !

Application : théorème de non-clonage → crypto quantique.

A envoie 100 particules dans des états  $|\pm, x\rangle$  ou  $|\pm, z\rangle$ , au hasard.

B mesure le spin selon un axe aléatoire  $(Ox)$  ou  $(Oz)$ .

B transmet ses choix d'axes et ses 50 premiers résultats.

50 premiers résultats → test de sûreté, 50 derniers → clé de codage.

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 70 / 74

**Et après ?**

Théorie quantique relativiste (Dirac, 1928) → incohérences.

Théories quantiques des champs :

- Électrodynamique quantique (Feynman, Schwinger, Tomonaga, Dyson ~ 1940)
- Théories de jauge (Yang-Mills, 1954)
- Théorie électrofaible (Glashow, 1961)
- Chromodynamique (Gell-Mann, etc. . . ~ 1960–1970)
- Modèle standard (Weinberg, Salam, etc. . . ~ 1970)

À part : théorie de l'espace-temps et de la gravitation :

→ Relativité générale (Einstein, 1916).

Gravité quantique attendue pour longueur ou énergie de Planck :  $\ell_P = \sqrt{\frac{\hbar G}{c^3}} \sim 10^{-35} \text{m}$ ,

$$E_p = \sqrt{\frac{\hbar c^5}{G}} \sim 10^{16} \text{TeV}.$$

LHC →  $L \sim 10^{-19} \text{m}$ ,  $E \sim 10 \text{ TeV}$

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 72 / 74

**Mais... ce n'est pas la fin de l'histoire !**

Ce qu'on comprend bien avec tout ça :

Échelle en m	$10^{25}$	$10^{23}$	$10^{14}$	$10^{-10}$	$10^{-15}$	$10^{-18}$	$10^{-35}$
Objets	Univers	Galaxie	Système solaire	Atome	Proton	Particules élémentaires	?
Statut	Théorie validée	TV	TV	TV	TV	validation en cours	conjectures
Énigmes	énergie noire	matière noire	Pioneer			oscillations des neutrinos	plein !

1. TQC et RG ne marchent pas ensemble !
2. C'est assez compliqué (35 champs, 18 paramètres)
3. Reste des énigmes

Comment aller plus loin ?

1. théorie des cordes ?
2. loop quantum gravity ?
3. géométrie non commutative ?
4. Twisteurs, supergravité, causal sets, triangulations dynamiques, etc. . .

Introduction à la mécanique quantique

Cours d'ouverture (EPF3) – 73 / 74

## Quelques mots de conclusion

- Image du monde qui n'est pas figée.
- Ne veut pas dire qu'avant on avait tout faux !
- Importance du débat et de la réfutabilité.
- "bon sens" ne marche pas bien.
- Concepts "évidents" à l'échelle humaine (position, vitesse, etc. . . ) inadaptés à l'échelle microscopique.
- Concepts classiques émergent du quantique et du relativiste, paradoxes apparaissent quand on tente de faire l'inverse.
- De plus en plus besoin des maths, de plus en plus difficiles à interpréter.
- On sait qu'il manque une pièce importante au puzzle.

**J'espère que ça vous a plu !**