Au-delà de la physique ondulatoire :

les principes généraux de la mécanique quantique

Chapitre 5

Pourquoi généraliser la physique ondulatoire ?

Formalisme adapté à la description de la dynamique d'une particule ponctuelle

$$\psi(x,t)$$

Mais il est souhaitable de pouvoir aller au-delà pour traiter :

- des systèmes à plusieurs particules
- des degrés de liberté qui ne se ramènent pas à une variable continue comme la position :

polarisation du photon,
saveur du neutrino,
spin de l'électron,…

Ce qui est essentiel dans la physique ondulatoire (I)

Le principe de superposition :

Si $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ sont deux fonctions d'onde possibles, alors toute combinaison linéaire

$$\alpha_1\,\psi_1(x)+\alpha_2\,\psi_2(x) \qquad \alpha_1,\ \alpha_2 \text{ complexes}$$

est également une fonction d'onde possible (à un facteur de normalisation près).

Espace vectoriel : fonctions de carré sommable

Cet espace est muni d'un produit scalaire et d'une norme « naturels »:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int \psi_1^*(x)\,\psi_2(x)\;dx$$

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \int \psi^*(x)\,\psi(x)\;dx$$

Ce qui est essentiel dans la physique ondulatoire (II)

Probabilité pour les résultats de mesure d'une grandeur A

➡ Etats propres et valeurs propres de l'observable associée $\hat{A}$

$$\hat{A}\psi_\alpha(x) = a_\alpha\;\psi_\alpha(x)$$

Résultats de mesure possibles : a_α

« Base » orthonormée de fonctions propres ψ_α : $\int \psi_\beta^*(x)\,\psi_\alpha(x)\;dx = \delta_{\alpha,\beta}$

➡ Pour tout ψ : $\psi(x) = \sum_\alpha C_\alpha \psi_\alpha(x)$ avec $\sum_\alpha |C_\alpha|^2 = 1$

Expression des coefficients C : $C_\beta = \int \psi_\beta^*(x)\,\psi(x)\,dx = \langle\psi_\beta|\psi\rangle$

➡ La probabilité $\mathcal{P}(a_\alpha)$ de trouver le résultat a_α est

$$\mathcal{P}(a_\alpha) = |C_\alpha|^2 = |\langle\psi_\alpha|\psi\rangle|^2$$

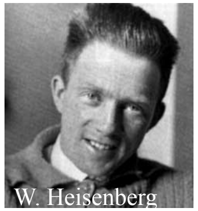
Le but de ce cours

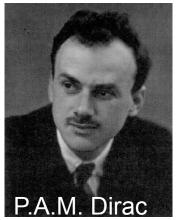
Dégager la structure géométrique de la théorie ondulatoire

Vecteurs, produit scalaire, …

En déduire une formulation de la mécanique quantique valable pour n'importe quel objet, et pas seulement une particule ponctuelle.

Formalisme adapté à la fois aux espace de dimension infinie (espace de fonctions) et aux espaces de dimension finie (polarisation du photon par ex.)





1.

Espace de Hilbert, « kets » et « bras »

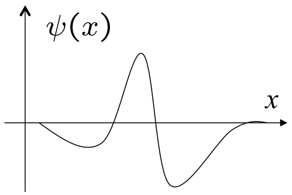
Espace de Hilbert : espace vectoriel de dimension finie ou infinie, muni d'une norme et d'un produit scalaire défini positif, complet et séparable (contient un ensemble dénombrable dense)

Exemple : espace des fonctions de carré sommable

Cours de maths de tronc commun, chapitre 8

Comment caractériser une fonction d'onde ψ ?

ψ : fonction continue et normée



1. On peut se donner l'ensemble des valeurs de ψ en tout point x

Infinité non dénombrable de valeurs

2. On peut se donner l'ensemble des valeurs de sa transformée de Fourier

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x)\, e^{-ipx/\hbar}\, dx$$

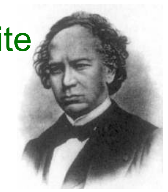
Infinité non dénombrable de valeurs

3. On peut développer cette fonction sur une « base hilbertienne » ϕ_n

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n\, \phi_n(x)$$

Infinité dénombrable de coefficients C_0, C_1, …

Une base particulière : les fonctions de Hermite



$$\phi_n(x) = a_n\, e^{x^2/2}\, \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right) \qquad n \in \mathbb{N}$$

$$\phi_0(x) \propto e^{-x^2/2} \qquad \phi_1(x) \propto x\, e^{-x^2/2} \qquad \phi_2(x) \propto (2x^2 - 1)\, e^{-x^2/2}$$

Le choix $a_n = \dfrac{(-1)^n}{(\sqrt{\pi}\, 2^n\, n!)^{1/2}}$ conduit à $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_m(x)\, \phi_n(x)\, dx = \delta_{m,n}$

Ensemble orthonormé, qu'on retrouvera comme états propres de l'hamiltonien d'un oscillateur harmonique

Posons $C_n = \langle \phi_n | \psi \rangle = \displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \phi_n(x)\, \psi(x)\, dx$

alors $\psi(x) = \displaystyle\sum_n C_n\, \phi_n(x)$

Le ket

Appellation introduite par Dirac (1926)

$$\begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ C_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \longleftrightarrow |\psi\rangle \quad \begin{array}{l} \nearrow\!\!\!\!\swarrow \ \psi(x) \\ \searrow\!\!\!\!\nwarrow \ \varphi(p) \end{array}$$

Ket = vecteur normé
= élément d'un espace vectoriel (de dimension infinie pour les fonctions d'onde)

L'espace des états d'un système quantique quelconque

A chaque système physique est associé un espace de Hilbert $\mathcal{E}_H$

L'état du système est défini à chaque instant par un ket (vecteur normé)

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

- L'espace de Hilbert peut selon les cas être de dimension infinie ou finie
- Cette structure d'espace vectoriel assure le principe de superposition
- Existences de bases hilbertiennes :

$$|\psi(t)\rangle \longleftrightarrow \begin{pmatrix} C_0(t) \\ C_1(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Le produit scalaire de deux kets

On se donne $|\psi_a\rangle$, $|\psi_b\rangle$ et on note leur produit scalaire $\langle\psi_b|\psi_a\rangle$

Produit scalaire antilinéaire à gauche, linéaire à droite

Si on connaît le développement de $|\psi_a\rangle$, $|\psi_b\rangle$ sur une base hilbertienne orthonormée:

$$|\psi_a\rangle = \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad |\psi_b\rangle = \begin{pmatrix} D_0 \\ D_1 \\ \vdots \end{pmatrix} \qquad \text{alors :} \quad \langle\psi_b|\psi_a\rangle = \sum_n D_n^* C_n$$

Les vecteurs acceptables pour décrire l'état d'un système sont de norme 1 :

$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

Le « Bra »

On définit le « bra » $\langle\psi_b|$ associé au ket $|\psi_b\rangle$: $\quad |\psi_b\rangle = \begin{pmatrix} D_0 \\ D_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$

$$\langle\psi_b| = (D_0^* \ , \ D_1^* \ , \ \ldots)$$ matrice ligne

Le produit scalaire des kets $|\psi_a\rangle$ et $|\psi_b\rangle$: $\quad \langle\psi_b|\psi_a\rangle = \sum_n D_n^* C_n$

peut s'interpréter comme le produit matriciel de la matrice ligne $\langle\psi_b|$ par la matrice colonne $|\psi_a\rangle$

$$\langle\psi_b|\psi_a\rangle = \langle\psi_b| \ \times \ |\psi_a\rangle = (D_0^* \ , \ D_1^* \ , \ \ldots) \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

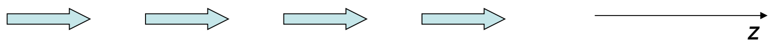
$$\text{bracket} \ = \ \text{bra} \ \times \ \text{ket} = \text{nombre complexe}$$

2.

Un exemple simple : la polarisation du photon

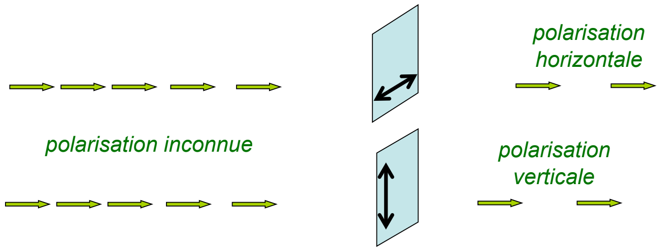
La polarisation d'un photon

On dispose désormais de sources délivrant des photons "un par un".



On considère un photon de vecteur d'onde $\vec{k} = k_0\,\vec{u}_z$ bien défini.
Comme pour le champ électromagnétique classique, il y a un degré de liberté supplémentaire pour le photon : sa polarisation.

Pour préciser l'état de polarisation d'un photon, on utilise un polariseur



Polarisations horizontales et verticales

On note par convention l'état de polarisation

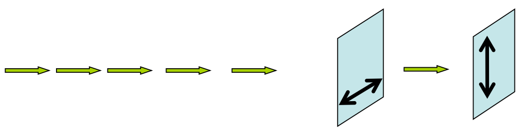
horizontal par le ket $|\leftrightarrow\rangle$

vertical par le ket $|\updownarrow\rangle$

Ces deux kets sont normés et orthogonaux entre eux

$$\langle\leftrightarrow|\leftrightarrow\rangle = 1$$

$$\langle\updownarrow|\updownarrow\rangle = 1 \qquad \langle\updownarrow|\leftrightarrow\rangle = 0$$

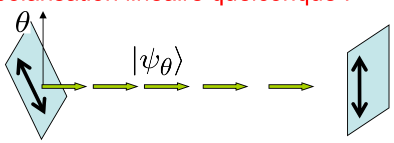


RIEN NE SORT

Photon de polarisation quelconque

L'état de polarisation le plus général peut s'écrire comme combinaison des deux états de polarisation linéaire horizontale et verticale

polarisation linéaire quelconque : $|\psi_\theta\rangle = \cos\theta|\updownarrow\rangle + \sin\theta|\leftrightarrow\rangle$



probabilité de transmission: $\cos^2\theta$

Loi de Malus

Espace de Hilbert de dimension 2

$$\begin{pmatrix} C_h \\ C_v \end{pmatrix} \longleftrightarrow |\psi\rangle = C_h|\leftrightarrow\rangle + C_v|\updownarrow\rangle$$

Attention : C_h et C_v peuvent être complexes !

polarisation circulaire gauche ou droite : $|\psi_{G,D}\rangle = \dfrac{|\updownarrow\rangle \pm i|\leftrightarrow\rangle}{\sqrt{2}}$

3.

Opérateurs dans l'espace de Hilbert,

évolution et mesure de grandeurs physiques

Cours de maths de tronc commun, chapitre 9

Opérateurs linéaires et représentation matricielle

Un opérateur linéaire $\widehat{A}$ peut être caractérisé par sa matrice $[A_{p,n}]$ dans une base hilbertienne $|\phi_n\rangle$.

Élément de matrice : $A_{p,n} = \underbrace{\langle\phi_p|}_{\text{vecteur ligne}} \big(\underbrace{\widehat{A}}_{\text{matrice carrée}}\underbrace{|\phi_n\rangle}_{\text{vecteur colonne}}\big) \qquad = \langle\phi_p|\widehat{A}|\phi_n\rangle$

Le produit de matrices est associatif :
on peut faire le calcul dans n'importe quel ordre

Exemple (cf. PC) : opérateurs position et impulsion dans la base de Hermite

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \qquad \hat{p} = \frac{i}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

Heisenberg, 1924

Opérateurs hermitiens

Adjoint $\widehat{A}^\dagger$ d'un opérateur $\widehat{A}$: $[\widehat{A}^\dagger]_{p,n} = \left([\widehat{A}]_{n,p}\right)^*$

Un opérateur est hermitien (ou auto-adjoint) si : $\widehat{A} = \widehat{A}^\dagger$

Exemples : $\widehat{x},\ \widehat{p}_x,\qquad \widehat{A} = \begin{pmatrix} 5 & 2+3i \\ 2-3i & -1 \end{pmatrix}$

Théorème spectral : un opérateur hermitien est diagonalisable et on peut former une base hilbertienne $\{|\psi_n\rangle\}$ avec ses vecteurs propres

$$\widehat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle \qquad \langle\psi_p|\psi_n\rangle = \delta_{p,n}$$

Les valeurs propres a_n sont réelles

Attention aux subtilités en dimension infinie…

L'opérateur énergie ou hamiltonien

Quantité physique : énergie E $\longrightarrow$ Opérateur énergie : hamiltonien $\widehat{H}$
hermitien

La forme de l'énergie dépend (comme en physique classique) du problème :

➡ Particule de masse m dans un potentiel : $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$

➡ Dipôle électrique dans un champ électrique extérieur $\vec{E}$

$$\widehat{H} = -\widehat{\vec{D}}\cdot\vec{E}$$

➡ Dipôle magnétique dans un champ magnétique extérieur $\vec{B}$

$$\widehat{H} = -\widehat{\vec{\mu}}\cdot\vec{B}$$

Évolution dans le temps

Tant que le système n'est soumis à aucune observation, l'évolution de son vecteur d'état est donnée par l'équation de Schrödinger

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

➡ La norme est conservée car l'hamiltonien est hermitien

➡ Si on connaît les états propres de $\hat{H}$, supposé ici indépendant du temps,

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

cette équation est facile à résoudre. On décompose :

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n C_n|\psi_n\rangle \quad \text{avec} \quad C_n = \langle\psi_n|\psi(0)\rangle$$

et on trouve : $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n|\psi_n\rangle\, e^{-iE_nt/\hbar}$

Mesures de grandeurs physiques

Une grandeur physique A est représentée par un opérateur hermitien $\hat{A}$

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n\,|\psi_n\rangle \qquad \langle\psi_p|\psi_n\rangle = \delta_{p,n}$$

➡ Le résultat d'une mesure de A est une des valeurs propres a_n de $\hat{A}$

➡ Si le système est dans l'état $|\psi\rangle$, la probabilité de trouver a_n est

$$\mathcal{P}(a_n) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2$$ *cas non-dégénéré*

➡ Juste après une mesure ayant donné le résultat a_n, l'état du système devient $|\psi_n\rangle$, ce qui assure qu'une deuxième mesure <u>immédiatement</u> après la première donnera le même résultat a_n.

Remarque : Si $\hat{A} \neq \hat{H}$, alors l'état $|\psi_n\rangle$ n'est pas stationnaire : si on attend entre les deux mesures, le résultat n'est plus certain.

Exercice : On considère $N \gg 1$ systèmes tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$. Sur chaque système, on effectue une mesure de A. Montrer que la moyenne $\langle a\rangle$ des résultats vaut : $\langle a\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$

Attention aux subtilités en dimension infinie…

➡ En dimension finie, dans un espace de Hilbert de dimension N, une base contient N éléments et un opérateur hermitien $\hat{A}$ a au plus N valeurs propres distinctes $a_1,\ a_2, \ldots, a_N$

➡ En dimension infinie, certains opérateurs hermitiens ont un spectre (c'est-à-dire un ensemble de valeurs propres) totalement discret pour lesquels le théorème spectral s'applique.

D'autres opérateurs ont un spectre (au moins en partie) continu, qu'on ne peut pas repérer par un indice entier n.

La description correcte du second type d'opérateurs fait appel à la théorie des distributions, et sort du cadre de ce cours

Exemples de subtilité en dimension infinie

➡ Un « bon » opérateur : l'hamiltonien de l'oscillateur harmonique

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Spectre discret : $E_n = \hbar\omega\,(n + 1/2)$, $n \in \mathbb{N}$

Fonct. propres = fonct. de Hermite : $e^{-x^2/2a^2},\ x\,e^{-x^2/2a^2},\ \ldots \quad a = \sqrt{\hbar/m\omega}$

Elles appartiennent à l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable

➡ Un opérateur « délicat » : l'opérateur impulsion

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$$

Spectre continu : $\hbar k$ ensemble des nombres réels

Fonctions propres : e^{ikx}

Elles n'appartiennent pas à l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable

4.

Un exemple : l'oscillation des neutrinos

Familles de particules

	Charge	1ère famille	2ème famille	3ème famille
Leptons	-1	e *électron*	μ *muon*	τ *tau*
	0	ν_e *neutrino électronique*	ν_μ *neutrino muonique*	ν_τ *neutrino tauique*
Quarks	2/3	u *up*	c *charm*	t *top*
	-1/3	d *down*	s *strange*	b *bottom*

1 p *proton* $\longrightarrow$ uud

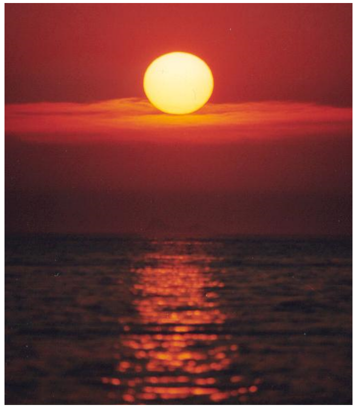
0 n *neutron* $\longrightarrow$ udd

$n \longrightarrow p + e + \overline{\nu}_e$

+ bosons messagers des forces : photons, Z^0, W^-, W^+, gluons, graviton (?)

+ boson de Higgs

L'énigme des neutrinos solaires



Les réactions nucléaires au sein du soleil entraînent l'émission d'un nombre considérable de neutrinos électroniques.

bilan : $2\mathrm{e}^- + 4\mathrm{p} \to {}^4_2\mathrm{He} + 2\nu_e + 26.7\ \mathrm{MeV}$

Selon les modèles les plus précis, 65 milliards de neutrinos électroniques devraient arriver sur terre chaque seconde sur une surface de 1 cm^2

Les signaux mesurés correspondent à la moitié de ce flux

Où sont les neutrinos manquants ?

L'hypothèse des oscillations de neutrinos

Les neutrinos manquants sont toujours présents, mais ils ont changé de « saveur » : ils ont basculé de l'état « neutrino électronique » vers un des deux autres états « neutrino muonique » ou « neutrino tauique »

Vérifié expérimentalement !

Description de l'entité "neutrino" dans un espace à trois dimensions:

➡ états de saveur bien déterminée : $|\nu_e\rangle\ ,\ |\nu_\mu\rangle\ ,\ |\nu_\tau\rangle$

➡ états de masse (donc d'énergie) bien déterminée : $|\nu_1\rangle\ ,\ |\nu_2\rangle\ ,\ |\nu_3\rangle$

$$m_1 \neq m_2 \neq m_3$$

Matrice de changement de base : matrice unitaire 3×3

Si les deux bases ne coïncident pas, on a par exemple :

à l'instant d'émission : $|\psi(0)\rangle = |\nu_e\rangle = \cos\theta\,|\nu_1\rangle + \sin\theta\,|\nu_2\rangle$

après propagation : $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar}\cos\theta\,|\nu_1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar}\sin\theta\,|\nu_2\rangle$

Oscillation de la saveur d'un neutrino

$$|\psi(0)\rangle = |\nu_e\rangle = \cos\theta\,|\nu_1\rangle + \sin\theta\,|\nu_2\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_1 t/\hbar}\cos\theta\,|\nu_1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar}\sin\theta\,|\nu_2\rangle$$

Un calcul simple conduit à :

$$P_e(t) = |\langle\nu_e|\psi(t)\rangle|^2 = 1 - \sin^2 2\theta\ \sin^2((E_1 - E_2)t/\hbar)$$

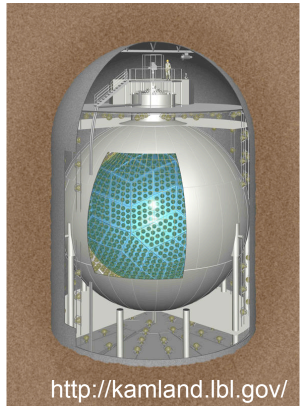
Energie en relativité (particule de masse *m* et d'impulsion *p*) :

$$E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$$

La vitesse des neutrinos est proche de *c* ($p \gg mc$):

$$t \simeq L/c \qquad\qquad E_1 - E_2 \simeq \frac{(m_1^2 - m_2^2)c^3}{2p}$$

Principe du détecteur de Kamland



Mesure les antineutrinos émis par les réacteurs du Japon et de la Corée : distance moyenne 180 km

1000 tonnes d'un liquide organique qui peut scintiller au passage d'un antineutrino

$$\bar{\nu}_e + p \to e^+ + n$$

2000 photomultiplicateurs

2179 détections attendues sur 5 ans en absence d'oscillation

1609 détections mesurées

Analyse du déficit en fonction de l'énergie des neutrinos :

$$|m_1^2 - m_2^2|c^4 = 8\,10^{-5}\ \mathrm{eV}^2 \qquad\qquad \tan^2\theta = 0.5$$

enjeu cosmologique essentiel

Non-commutation des observables

Il est impossible de préparer un neutrino dans un état pour lequel les résultats de mesure de saveur et d'énergie sont tous deux certains.

L'opérateur Hamiltonien

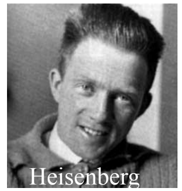
$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix} \quad \text{dans la base} \quad \{|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle, |\nu_3\rangle\}$$

ne commute pas avec l'opérateur saveur dont les états propres sont

$$\{|\nu_e\rangle, |\nu_\mu\rangle, |\nu_\tau\rangle\}$$

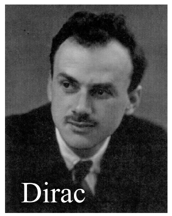
Si deux observables $\hat{A}$ et $\hat{B}$ ne commutent pas $(\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A})$ elles n'ont en général pas de vecteur propre commun : on ne peut pas préparer le système dans un état où les quantités A et B sont certaines

Position et impulsion



Heisenberg (1925) : on ne doit s'intéresser qu'à ce qui est observable, c'est-à-dire les raies spectrales pour un atome

« Multiplication symbolique »



Born

Jordan

$$\hat{x}\,\hat{p}_x - \hat{p}_x\,\hat{x} = i\hbar\,\hat{1}$$

à vérifier explicitement en faisant agir les opérateurs sur une fonction d'onde quelconque $\psi(x)$

La synthèse de la théorie quantique

Expériences : raies spectrales, Rutherford, Franck et Hertz,
Stern et Gerlach, Davisson et Germer

Bohr (1913), Sommerfeld (1916)

Physique ondulatoire	**Mécanique des matrices**
de Broglie (1923)	Heisenberg, Born, Jordan (1925)
Schrödinger (1925-26)	Dirac (1925) lien avec la mécanique analytique

synthèse : Schrödinger, Dirac

fondements mathématiques rigoureux : Hilbert, von Neumann

+ spin, particules identiques, relativité, etc. : Pauli, Dirac, Einstein, Fermi,…

CONGRES SOLVAY DE 1927

Picard Henriot Ehernfest Herzen de Donder Schrödinger Verschaffelt Pauli Heisenberg Fowler brillouin
Debye Knudsen Bragg Kramers Dirac Compton L. de Broglie Born Bohr
Langmuir Planck Mme Curie Lorentz Einstein Langevin Guye Wilson Richardson