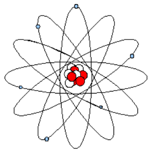
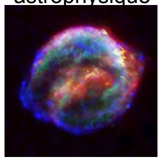
Le cours de physique (18 blocs) : mécanique quantique (7) et physique statistique (11)

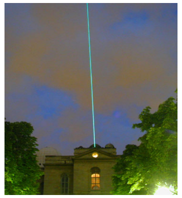


atomes

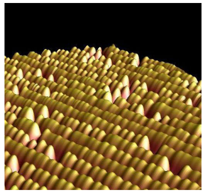
résonance magnétique

astrophysique





laser



Matière complexe

nature du “réel”

Outils pour le cours de mécanique quantique

Livres (existent aussi en anglais) :

- « Mécanique quantique »
- « Problèmes quantiques »

Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard

+ CD-rom d’illustrations et de simulations, Manuel Joffre

Chaque semaine: un QCM à remplir à l’adresse :

http://www.enseignement.polytechnique.fr/profs/physique/Manuel.Joffre/qcm/

même identifiant et mot de passe que pour se connecter en salle info

date limite : lundi soir, 23:59

Fichier pdf des diapositives et infos sur le cours:
http://www.phys.ens.fr/~dalibard/PHY432.htm

Principes de la mécanique quantique

Idées clés de la description quantique d'un système physique :

- Etats du système
- "Observables" de ce système
- Evolution dans le temps du système

Commutation d’observables

Relations d’incertitude (PC)

1.

Quand a-t-on besoin de la mécanique quantique ?

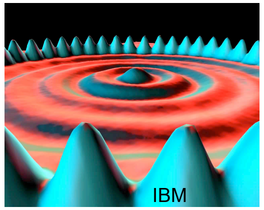
Physique newtonienne ou physique ondulatoire ?

Particule ponctuelle de masse m (non relativiste)

Newton $(\vec{r}(t), \vec{p}(t))$

Electrons confinés sur un “billard” formé par 48 atomes de fer sur une surface de cuivre

Schrödinger $\psi(\vec{r}, t)$

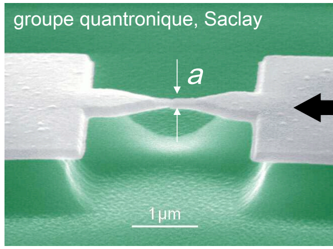


Les concepts classiques cessent de s'appliquer quand :

action caractéristique < constante de Planck h

action = longueur $\times$ impulsion = énergie $\times$ temps

Conduction d’électrons par un fil



Pont d’aluminium sur un isolant

électron d’impulsion p

action caractéristique pa
à comparer à la cte. de Planck h

Description quantique en terme d'onde plane de longueur d'onde

$\lambda = h/p$ (de Broglie)

Les phénomènes non classiques (diffraction) seront dominants si

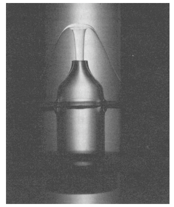
$$\lambda = h/p > a \quad \Rightarrow \quad h > pa$$

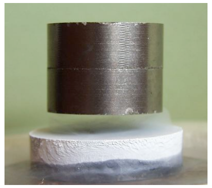
Ordres de grandeur $(h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js$)$

Système considéré	Masse (kg)	Vitesse (m/s)	Taille de l'ouverture (m)	$p\,a\,/\,h$
Homme passant une porte	70	1	1	10^{35}
Globule rouge dans un capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{11}
Electron dans un fil étroit	$9\ 10^{-31}$	10^{6}	10^{-9}	1

La physique quantique peut être macroscopique

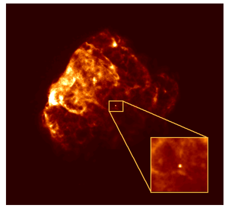
Superfluidité de l'hélium liquide à basse température (T < 2,3 K)





Supraconductivité de certains métaux à basse température

Stade ultime de l’évolution stellaire : les étoiles à neutrons



Effets quantiques marqués si :

distance entre voisins $< \lambda_{\text{deBroglie}}$

Une particule ponctuelle

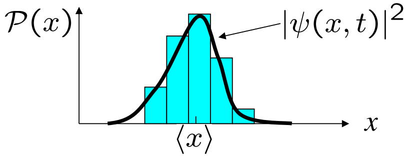
Particule ponctuelle de masse m dans un état $\psi(\vec{r},t)$

fonction d'onde complexe, continue et $\int |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d^3r = 1$

Mesure de position : résultat incertain

→ variable aléatoire de densité de probabilité $|\psi(\vec{r},t)|^2$

Si on effectue une mesure de position sur un grand nombre de particules, toutes préparées dans le même état ψ, on peut tracer un histogramme :



position moyenne :

$$\langle x \rangle = \int x \, |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d^3r$$

Formulation générale

L'état d'un système est caractérisé par un vecteur $|\psi(t)\rangle$ d'un espace de Hilbert

Particule ponctuelle : $\psi(\vec{r},t)$

Atome d'hydrogène : $\psi(\vec{r}_{\text{élec.}}, \vec{r}_{\text{prot.}}, t)$

Fonctions de carré sommable

Autres types de degrés de liberté : moment magnétique, spin, polarisation

→ *Espaces de dimension finie*

Le vecteur $|\psi(t)\rangle$ est normé : $\| \, |\psi(t)\rangle \, \|^2 = \langle \psi(t)|\psi(t)\rangle = 1$

relation qui généralise $\int |\psi(\vec{r},t)|^2 \, d^3r = 1$

Exemple : états de 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.

L'état de polarisation peut s'écrire comme combinaison des deux états de polarisation linéaire $|\updownarrow\rangle$ et $|\leftrightarrow\rangle$ → dimension 2

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

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

2.

Quantités physiques et « observables »

Observables

Relation entre le formalisme et les quantités mesurables

→ A toute grandeur physique A, on associe un opérateur $\hat{A}$ agissant dans l'espace de Hilbert

En dimension finie, $\hat{A}$ est une matrice carrée

→ Les opérateurs $\hat{A}$ associés aux grandeurs physiques sont hermitiens

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \qquad \underbrace{\langle\psi_1|}_{\text{vecteur ligne}}\underbrace{\hat{A}}_{\text{matrice carrée}}\underbrace{|\psi_2\rangle}_{\text{vecteur colonne}} = \left(\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle\right)^*$$

Observables

→ Un opérateur hermitien est diagonalisable, ses valeurs propres sont réelles et on peut former une base orthonormée avec ses vecteurs propres

$$\hat{A}\,|\psi_\alpha\rangle = a_\alpha\,|\psi_\alpha\rangle$$

a_α réel

$\{|\psi_\alpha\rangle\}$ base orthonormée

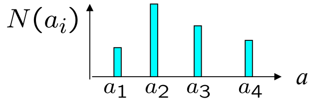
Mesures individuelles et valeurs moyennes

Principe :

- Dans une mesure de A, les seuls résultats possibles sont les valeurs propres a_α de $\hat{A}$.
- La probabilité de trouver la valeur propre a_α , de vecteur propre $|\psi_\alpha\rangle$ est dans le cas non dégénéré :

$$P(a_\alpha) = |\langle\psi_\alpha|\psi\rangle|^2$$

Valeur moyenne des résultats d'une mesure de A, effectuées sur un grand nombre de systèmes tous préparés dans l'état $|\psi\rangle$:

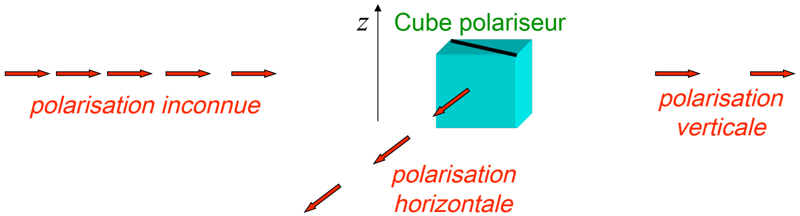


$$\langle A\rangle = \sum_\alpha P(a_\alpha)\,a_\alpha$$

$$\Rightarrow \quad \langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

à montrer en exercice

Mesure de la polarisation d'un photon



Observable : composante de la polarisation le long de l'axe z

2 résultats possibles :

$\epsilon_z = 1$ photon de polarisation verticale

$\epsilon_z = 0$ photon de polarisation horizontale

Notion qui sera approfondie lors de l'étude de l'expérience de Stern & Gerlach

Le cas de la particule ponctuelle (1)

A toute grandeur de la physique newtonienne $A(\vec{r},\vec{p})$, on associe un opérateur $\hat{A}$

$$\langle A\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\,\left[\hat{A}\psi(\vec{r},t)\right]\,d^3r$$

Position moyenne

$$\langle x\rangle = \int x\,|\psi(\vec{r},t)|^2\,d^3r = \int \psi^*(\vec{r},t)\,x\,\psi(\vec{r},t)\,d^3r$$

$$\langle\vec{r}\rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\,\vec{r}\,\psi(\vec{r},t)\,d^3r$$

Action de l'opérateur position $\hat{\vec{r}}$ sur $\psi(\vec{r})$: multiplication par $\vec{r}$

Le cas de la particule ponctuelle (2)

Impulsion moyenne : $\langle \vec{p} \rangle = \int \psi^*(\vec{r},t)\ \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r},t)\ d^3r$

Action de l'opérateur impulsion $\hat{\vec{p}}$ sur $\psi(\vec{r})$:

$(\hbar/i)\times$ dérivation par rapport à $\vec{r}$ (gradient)

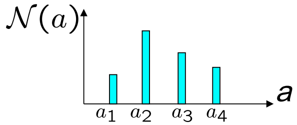
« Opérateur énergie » ou « hamiltonien », pour une particule dans un potentiel

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{r}})$$

action sur $\psi(\vec{r})$: $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})$

Peut-on prédire le résultat d'une mesure individuelle ?

On considère N systèmes tous préparés dans le même état $|\psi\rangle$



Valeur moyenne des résultats : $\langle a \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$

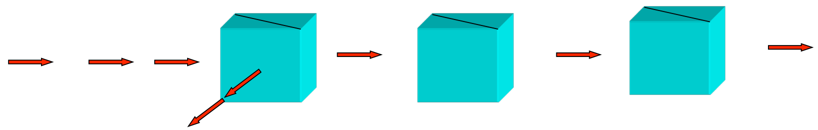
Variance : $\Delta a^2 = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2$
$= \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \left(\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \right)^2$

Peut-on avoir un résultat certain ?

Variance nulle si et seulement si $|\psi\rangle$ est état propre de $\hat{A}$

$|\psi\rangle = |\psi_\alpha\rangle \longrightarrow \begin{array}{l} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = a_\alpha \\ \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle = a_\alpha^2 \end{array} \longrightarrow \Delta a = 0$

démonstration de l'autre sens de l'équivalence à faire en exercice



Etat du système après une mesure

On considère un système quantique préparé dans un état $|\psi\rangle$

On effectue une mesure de la quantité physique A et on trouve le résultat a_α, valeur propre (supposée ici non dégénérée) de $\hat{A}$

La probabilité pour que ceci se produise est $P(a_\alpha) = |\langle \psi_\alpha | \psi \rangle|^2$

Si on remesure cette même grandeur A immédiatement après la première mesure, avant que le système n'ait pu évoluer sous l'effet d'autres causes, on s'attend à retrouver <u>avec certitude</u> le même résultat a_α

Ceci n'est possible que si l'état du système après la première mesure a été projeté sur l'état propre $|\psi_\alpha\rangle$

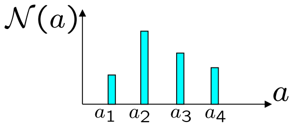
« Projection du paquet d'onde » : $|\psi\rangle \xrightarrow{a_\alpha} |\psi_\alpha\rangle$

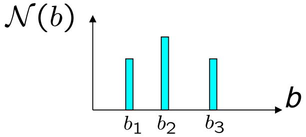
3.

Commutation d'observables

Peut-on prédire « simultanément » la valeur de deux grandeurs physiques?

On considère $2N$ systèmes préparés dans le même état $|\psi\rangle$





Mesure de A sur N systèmes

$\langle a\rangle \qquad \Delta a$

Mesure de B sur N systèmes

$\langle b\rangle \qquad \Delta b$

Peut-on avoir simultanément $\Delta a = 0$ et $\Delta b = 0$?

Il faut que l'état $|\psi\rangle$ soit à la fois état propre de $\hat{A}$ et état propre de $\hat{B}$

De tels états existent-ils ?

Observables qui commutent

Commutateur de deux observables : $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

Si deux observables commutent, c'est-à-dire si

$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ ou encore $[\hat{A},\hat{B}] = 0$

il existe une base formée de vecteurs propres communs à ces deux observables

$$[\hat{A},\hat{B}] = 0 \longrightarrow \{|\psi_i\rangle\} \quad \begin{aligned}\hat{A}|\psi_i\rangle &= \alpha_i\,|\psi_i\rangle \\ \hat{B}|\psi_i\rangle &= \beta_i\,|\psi_i\rangle\end{aligned}$$

Pour un système préparé dans l'état $|\psi_i\rangle$, le résultat d'une mesure des grandeurs physiques A ou B est certain : α_i ou β_i

Se généralise au cas de plusieurs observables

Jouera un rôle crucial dans l'étude de systèmes 3D (atome d'hydrogène)

Exemple : impulsion d'une particule ponctuelle

- Impulsion de la particule le long de l'axe x : $\hat{p}_x = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial x}$

  états propres de cet opérateur : $\psi(x,y,z) = e^{ik_x x}\,\phi(y,z)$

  onde plane dans la direction x, impulsion selon x : $\hbar k_x$
  fonction quelconque selon y et z

- Impulsion de la particule le long de l'axe y : $\hat{p}_y = \dfrac{\hbar}{i}\dfrac{\partial}{\partial y}$

  états propres : $\psi(x,y,z) = e^{ik_y y}\,\chi(x,z)$

- Les opérateurs $\hat{p}_x$ et $\hat{p}_y$ commutent. On peut préparer la particule dans un état où l'impulsion selon x et l'impulsion selon y sont simultanément bien définies :

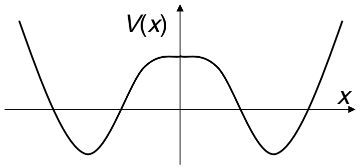
$$\psi(x,y,z) = e^{ik_x x}\,e^{ik_y y}\,F(z)$$

Exemple 2: comment tirer parti d'une symétrie ?

Mouvement dans un potentiel pair

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + V(\hat{x})$$

avec $V(x) = V(-x)$



On introduit l'opérateur "parité" $\hat{P}$ défini par $\hat{P}\,\psi(x) = \psi(-x)$

La symétrie de l'hamiltonien se traduit par : $[\hat{H},\hat{P}] = 0$

$\hat{H}$ et $\hat{P}$ ont donc une base de fonctions propres communes

$$\hat{P}^2 = 1 \longrightarrow \begin{cases}\text{Valeurs propres : } \pm 1 \\ \text{Etats propres: fonctions paires ou impaires}\end{cases}$$

On peut chercher les états propres de $\hat{H}$ sous forme de fonctions paires ou impaires

Observables qui ne commutent pas

Si deux observables ne commutent pas, c'est-à-dire si $[\hat{A},\hat{B}] \neq 0$,
il n'est en général pas possible de préparer le système dans un état où les quantités A et B sont bien déterminées.

Plus précisément : $\Delta a \, \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A},\hat{B}] | \psi \rangle \right|$ cf. PC

Exemple : le couple position impulsion selon un même axe. $[\hat{x},\hat{p}_x] = ?$

$$\left(x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} x \right) \psi(x) = i\hbar \, \psi(x) \longrightarrow [\hat{x},\hat{p}_x] = i\hbar$$

$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2$$

Relation démontrée l'an dernier à partir de la transformée de Fourier, apparaît ici comme conséquence d'une relation plus générale

Utilisation « heuristique » de la relation d'incertitude

La relation $\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2$ est souvent utilisée pour estimer l'ordre de grandeur de l'énergie et de l'extension de l'état fondamental dans un potentiel

$$\Delta x_{\text{fond}} \, \Delta p_{\text{fond}} \simeq \hbar/2$$

Exemple de l'oscillateur harmonique : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2$

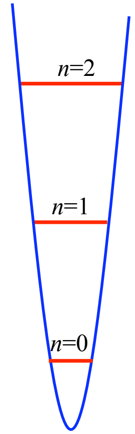
Etat fondamental : $\langle x \rangle = 0 \quad \langle p \rangle = 0 \longrightarrow \langle x^2 \rangle \, \langle p^2 \rangle \simeq \hbar^2/4$

Minimisation de $E = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle$ avec cette contrainte ?

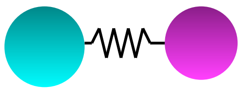
$$\frac{\langle p^2 \rangle}{2m} = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \longrightarrow E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

Coïncide avec le résultat exact !

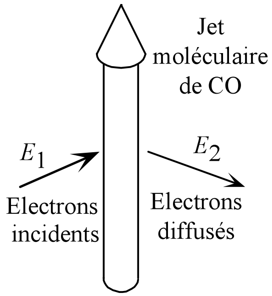
Rappel : spectre de l'osc. harm. $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$



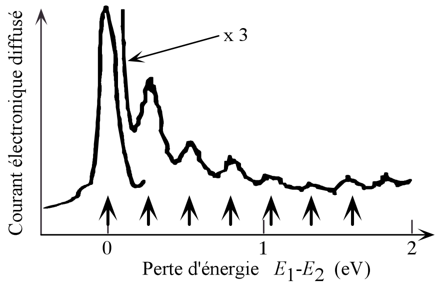
La vibration d'une molécule (CO)



1,13 Å



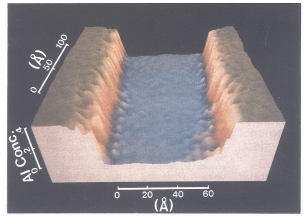
$\hbar\omega = 0,26$ eV



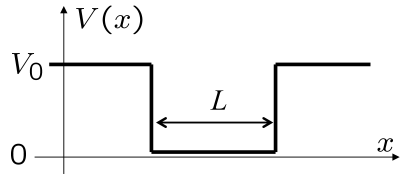
$\omega/2\pi = 6 \times 10^{13}$ Hz

Exemple 2 : électron dans un puits quantique

Sandwich de
Al Ga As – Ga As – Al Ga As



Potentiel électrostatique vu par un électron de conduction



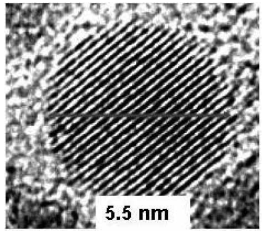
Estimation de l'énergie du fondamental dans la limite V_0 très grand

$$\Delta x \sim L/2 \;\Rightarrow\; \Delta p_x \sim \hbar/L \qquad E = \frac{\langle p_x^2 \rangle}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2mL^2}$$

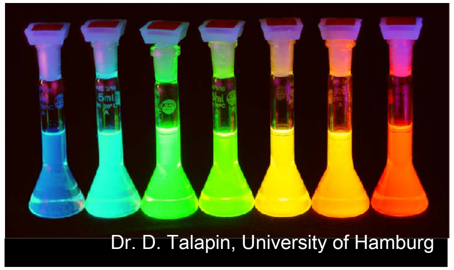
à comparer au résultat exact dans la limite $V_0 \to +\infty$

$$E_{\text{fond}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

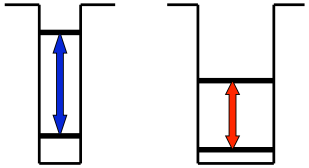
Emission de lumière par un « point quantique »



nanocristal d'or (Univ. Chicago)



Fluorescence induite par lumière UV sur des nanocristaux CdSe de taille croissante



4.

Evolution d'un système quantique (en dehors d'une mesure)

Evolution temporelle des systèmes

Principe : l'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\psi(t)\rangle$ est donnée par l'équation de Schrödinger

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

lien temps-énergie

Rôle équivalent à $m\dfrac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}(\vec{r},\vec{v})$ en physique newtonienne

Pour un système isolé, $\widehat{H}$ est indépendant du temps

Cette équation fait alors jouer un rôle particulier aux vecteurs propres de $\hat{H}$

Résolution de l'équation de Schrödinger

Si on a pu déterminer les vecteurs propres $|\psi_\alpha\rangle$ et les valeurs propres E_α

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

($\hat{H}$ indépdt. du temps)

alors, pour tout état initial $|\psi(0)\rangle$, il suffit de :

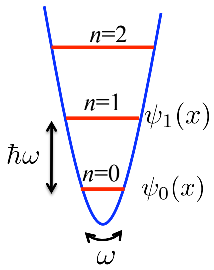
- décomposer $|\psi(0)\rangle$ sur la base $|\psi_\alpha\rangle$:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_\alpha C_\alpha\ |\psi_\alpha\rangle \quad \text{avec} \quad C_\alpha = \langle\psi_\alpha|\psi(0)\rangle$$

- obtenir le vecteur $|\psi(t)\rangle$ à n'importe quel instant ultérieur grâce à :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\alpha C_\alpha\ e^{-iE_\alpha t/\hbar}\ |\psi_\alpha\rangle$$

Exemple : oscillateur harmonique



Si l'état initial est $\psi(x,0) = \psi_0(x)$

alors $\psi(x,t) = e^{-iE_0 t/\hbar}\ \psi_0(x)$

$$\Rightarrow \quad |\psi(x,t)|^2 = |\psi_0(x)|^2$$

Pas de mouvement ! Etat stationnaire

Si l'état initial est $\psi(x,0) = (\psi_0(x) + \psi_1(x))\,/\sqrt{2}$

alors $\psi(x,t) = \left(e^{-iE_0 t/\hbar}\psi_0(x) \ + \ e^{-iE_1 t/\hbar}\psi_1(x)\right)/\sqrt{2}$

Modulation de $|\psi(x,t)|^2$ à la pulsation $(E_1 - E_0)/\hbar = \omega$

Par exemple : $\langle x\rangle(t) = x_0\ \cos(\omega t)$

En résumé…

La description quantique d'un système physique se fait dans l'espace de Hilbert « approprié »

Espace de dimension finie (2 pour la polarisation du photon) ou infinie (fonctions de carré sommable pour le mouvement d'une particule)

Les grandeurs physiques sont décrites par des observables, i.e. opérateurs hermitiens sur l'espace de Hilbert

Le résultat d'une mesure d'une quantité physique A ne peut être qu'une valeur propre de l'opérateur $\hat{A}$

Deux types d'évolution sont possibles d'un système quantique
- évol. « réversible » sous l'effet de l'hamiltonien en l'absence de mesure
- évol. « irréversible » (projection) lors d'une mesure