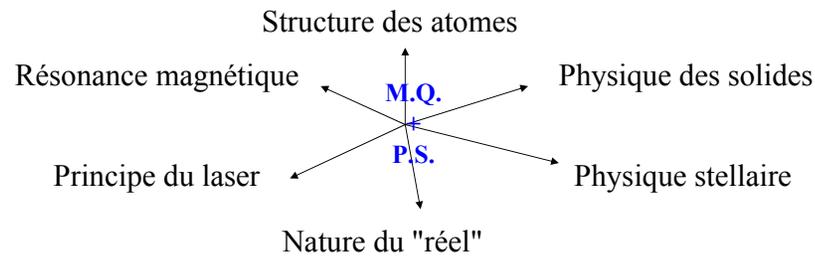


Le cours de physique

18 blocs pour apprendre la mécanique quantique et la physique statistique



Mécanique quantique (7 blocs) + Physique statistique (11 blocs)

Outils pour le cours de mécanique quantique

Livres (existent aussi en anglais) :

- « Mécanique quantique » Jean-Louis Basdevant et Jean Dalibard
- « Problèmes quantiques »

Les fichiers pdf des diapositives ainsi que les infos du cours sont disponibles à l'adresse :

<http://www.enseignement.polytechnique.fr/physique/>

→ cours → 2ème année → physique quantique et statistique PHY432
→ transparents

CD-rom d'illustrations et de simulations, Manuel Joffre

Principes de la mécanique quantique

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

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

Relations d'incertitude :

Avec quel degré de précision peut-on espérer connaître plusieurs grandeurs physiques simultanément ?

1.

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

Physique newtonienne ou physique ondulatoire ?

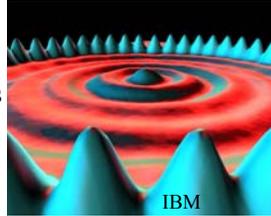
Particule ponctuelle de masse m (non relativiste)

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



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

Schrödinger : $\psi(\vec{r}, t)$

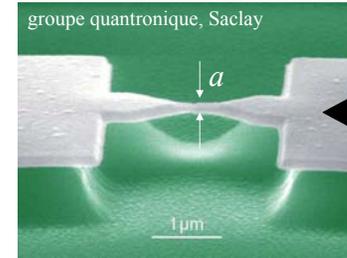


Les concepts classiques cessent de s'appliquer quand :

action caractéristique < constante de Planck h

action = longueur caractéristique \times impulsion caractéristique

Conduction d'électrons par un fil



Pont d'aluminium déposé 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

$$\lambda = h / p \quad \text{(de Broglie)}$$

Les phénomènes non classiques (diffraction) seront dominants si :

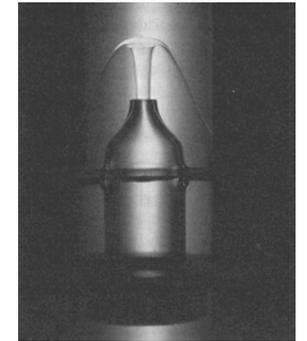
$$\lambda = h/p > a \implies h > pa$$

Ordres de grandeur ($h=6,63 \cdot 10^{-34}$ J s)

Système considéré	Masse (kg)	Vitesse (m/s)	Taille de l'ouverture (m)	pa/h
Homme passant une porte	70	1	1	10^{34}
Globule rouge dans un capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{11}
Electron dans un fil étroit	$9 \cdot 10^{-31}$	10^6	10^{-9}	1

La physique quantique peut également être macroscopique

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



Supraconductivité de certains métaux à basse température

Caractère quantique si : distance entre voisins < $\lambda_{\text{de Broglie}}$

2.

La description d'un système quantique

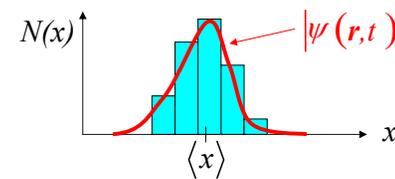
Une particule ponctuelle

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 : le résultat n'est pas certain
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 :

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

Position et impulsion pour une particule moyenne

Position moyenne

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

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

Impulsion moyenne

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

Formulation générale

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

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

Fonctions de carré sommable

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

Autres types de degrés de liberté : moment magnétique, spin, polarisation
→ *Espaces de dimension finie*

Le vecteur $|\psi(t)\rangle$ est normé :

$$\| |\psi(t)\rangle \|^2 = \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1 \quad \xrightarrow{\text{généralise}} \quad \int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1$$

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 $|\uparrow\rangle$ et $|\rightarrow\rangle$: **dimension 2**

polarisation linéaire quelconque : $|\theta\rangle = \cos\theta|\uparrow\rangle + \sin\theta|\rightarrow\rangle$

polarisation circulaire gauche ou droite : $|\psi_{G,D}\rangle = \frac{|\uparrow\rangle \pm i|\rightarrow\rangle}{\sqrt{2}}$

3.

Mesures sur un système quantique

Observables

Relation entre le formalisme et les quantités physiquement 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

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \quad \longrightarrow \quad \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle = \left(\langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_1 \rangle \right)^* \quad \text{Observables}$$

vecteur ligne matrice carrée vecteur colonne

$$\Rightarrow \hat{A} |\psi_\alpha\rangle = a_\alpha |\psi_\alpha\rangle \quad \begin{array}{l} a_\alpha \text{ réel} \\ \{|\psi_\alpha\rangle\} \text{ base orthonormée} \end{array}$$

Mesures individuelles

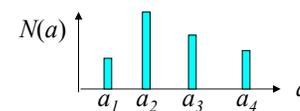
Principe :

- 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 associé $|\psi_\alpha\rangle$, est dans le cas non dégénéré :

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

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



$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i a_i N(a_i)}{\sum_i N(a_i)} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \quad (\text{réel})$$

Le cas de la particule ponctuelle

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

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

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

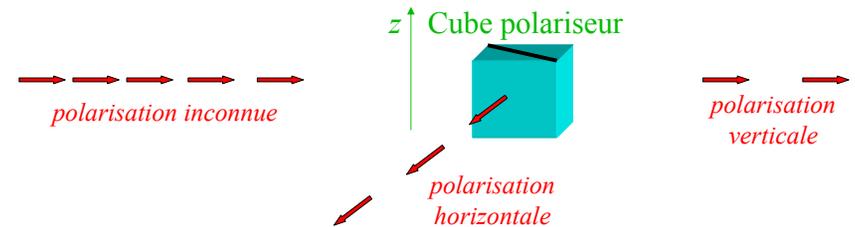
Action de l'opérateur impulsion $\hat{\vec{p}}$ sur $\psi(\vec{r})$:

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

Opérateur moment cinétique : $\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}}$

Action sur $\psi(\vec{r}, t)$ $\hat{L}_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$

Mesure de la polarisation d'un photon



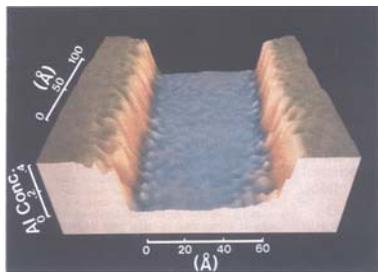
Observable : composante de la polarisation le long de l'axe z

2 résultats possibles : $\varepsilon_z=1$ photon de pol. verticale
 $\varepsilon_z=0$ photon de pol. horizontale

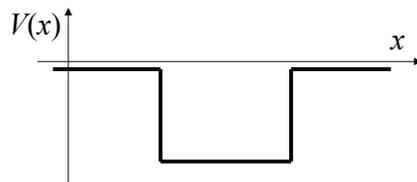
Notion qui sera approfondie lors de l'étude de l'expérience de Stern & Gerlach

Un exemple concret : énergie d'un électron dans un puits quantique

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



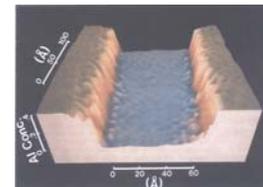
Potentiel électrostatique vu par un électron de conduction



Observable associée à l'énergie : hamiltonien

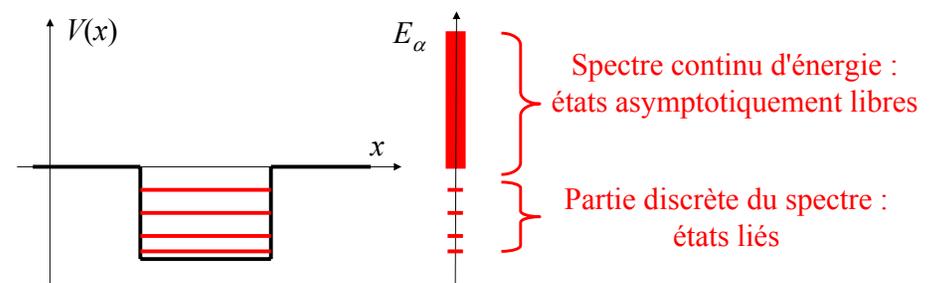
pour une particule ponctuelle à 1D : $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$

Le puits quantique (suite)

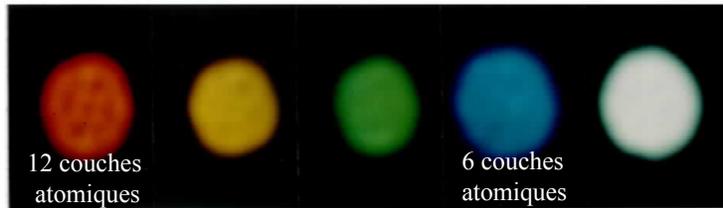


Une mesure de l'énergie de l'électron ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres E_α de l'hamiltonien :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''_\alpha(x) + V(x) \psi_\alpha(x) = E_\alpha \psi_\alpha(x)$$

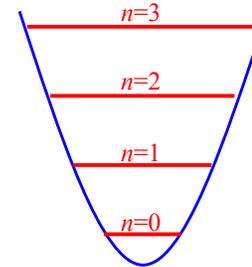


Emission de lumière par un puits quantique de nitrure de gallium



<http://www.crhea.cnrs.fr/crhea/index.htm>

Un autre exemple : l'oscillateur harmonique



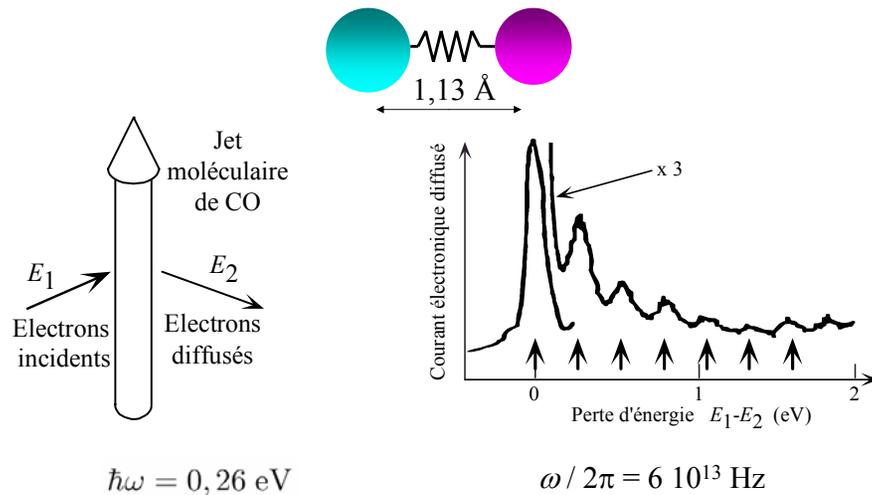
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Spectre discret : $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$

Etat fondamental ($n=0$) : fonction d'onde gaussienne

$$\psi_0(x) \propto \exp(-x^2 / 2a^2) \quad \text{avec} \quad a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

Exemple : vibration d'une molécule (CO)



4.

Evolution dans le temps 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 donné par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad \text{lien temps-énergie}$$

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

Pour un système isolé, \hat{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

$$\hat{H} |\psi_\alpha\rangle = E_\alpha |\psi_\alpha\rangle \quad (\hat{H} \text{ indépdt. du temps})$$

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

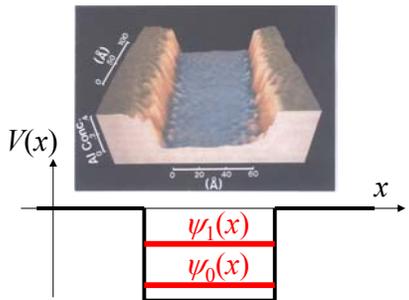
- décomposer $|\psi(0)\rangle$ sur la base $|\psi_\alpha\rangle$:

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

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

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

Un exemple d'évolution : mouvement dans un puits carré



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

$$\psi(x, t) = e^{-iE_0t/\hbar} \psi_0(x)$$

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

Pas de mouvement !

\longrightarrow *état stationnaire*

Si $\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0(x) + \psi_1(x))$

alors $\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-iE_0t/\hbar} \psi_0(x) + e^{-iE_1t/\hbar} \psi_1(x))$

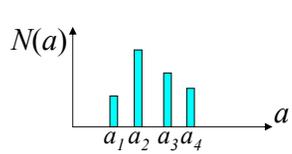
Modulation de $|\psi(x, t)|^2$ à la pulsation $(E_1 - E_0)/\hbar$

5.

Relations d'incertitude

Avec quelle précision peut-on mesurer une observable ?

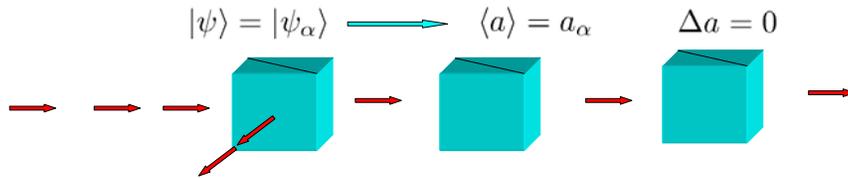
On considère N systèmes tous préparés dans le même état $|\psi\rangle$



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

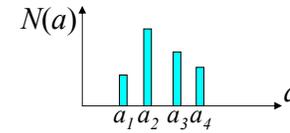
$$\text{Variance : } \Delta a^2 = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2 = \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \left(\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \right)^2$$

Peut-on avoir un résultat certain ($\Delta a = 0$) ? **Oui, si $|\psi\rangle$ état propre de \hat{A}**



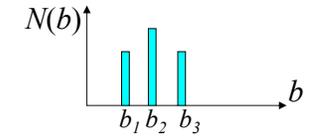
Avec quelle précision peut-on mesurer deux observables ?

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



Mesure de A sur N systèmes

$$\langle a \rangle \quad \Delta a$$



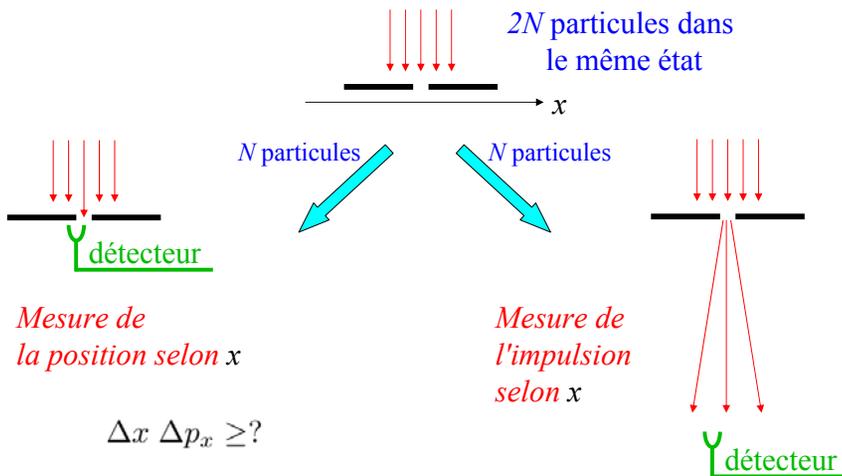
Mesure de B sur N systèmes

$$\langle b \rangle \quad \Delta b$$

Peut-on avoir simultanément $\Delta a = 0$ et $\Delta b = 0$? **En général, non !**

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right| \quad \text{avec} \quad [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Exemple d'application : position & impulsion



Position & impulsion (2)

Commutateur $[\hat{x}, \hat{p}_x] = ?$

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

La relation générale $\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|$

donne alors : $\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2$

Cette relation d'incertitude n'a rien à voir avec la résolution des appareils de mesure, c'est-à-dire la largeur des canaux des histogrammes