MECANIQUE QUANTIQUE 1

COURS 1 – INTRODUCTION A LA MECANIQUE ONDULATOIRE

QUENTIN GLORIEUX

3P001 – UNIVERSITE PIERRE ET MARIE CURIE 2015-2016

POURQUOI ENSEIGNER LA MECANIQUE QUANTIQUE ?

- Révolution conceptuelle du XXeme siècle.
  - “Fin” de la Mécanique de Newton !
  - “Fin” de l’Electromagnétisme de Maxwell !
  - Une nouvelle théorie cadre de la Physique moderne
- Révolution industrielle
  - Plus de 50% du PIB des pays développés découle directement d’une technologie basée sur la physique quantique. (laser, transistor, nucléaire, imagerie médicale...)
- Mécanique Quantique ou Physique Quantique ?

LES OUTILS DE CE COURS

- Les 15 CMs – Quentin Glorieux, principalement le mardi matin
- Les 15 TDs – 2 Groupes
  - Patricia Selles, Antoine Reigue, Quentin Glorieux : le mardi am
  - 2 types de TDs : classiques et résolution de problèmes.
- Les HPPs – 1 créneau par semaine : Antoine Reigue
- Les QCMs sur Sakai : OBLIGATOIRE à faire avant dimanche minuit !
- Le livre : J-L Basdevant & Jean Dalibard. Mécanique Quantique disponible ici : http://www.phys.ens.fr/~dalibard/Notes_de_cours/X_MQ_2003.pdf
- Ces slides (sur Sakai et sur www.optiquequantique.fr)
- Les labos de l’UPMC : LKB, INSP...
- NOTE : QCM + TDs + Examen.

PLAN DU COURS

- Mécanique Ondulatoire (3 séances)
  - Perspective historique
  - Fonction d’onde et longueur d’onde de de Broglie
  - Puits quantiques
- Outils Mathématiques et Mécanique Quantique (5 séances)
  - Espace de Hilbert, transformée de Fourier
  - Notations de Dirac
- Introduction du spin (3 séances)
  - Spin $\frac{1}{2}$, RMN...
  - Généralisation au moment cinétique
- Le Photon (2 séances)
  - Intrication, cryptographie et téleportation quantique
- L’atome d’hydrogène (2 séances)

COURS 1 – INTRODUCTION A LA MECANIQUE ONDULATOIRE

1. Une perspective historique sur les débuts de la Mécanique Quantique
   - Rayonnement du corps noir – Planck, Kirchhoff
   - Effet photo-électrique – Einstein, Milikan
   - Modèle de l'atome – Bohr, Franck & Hertz
   - Onde de matière - de Broglie, Davisson & Germer
2. La fonction d'onde
3. L'équation de Schrödinger
4. Solutions particulières de l'équation de Schrödinger
   - Ondes de Louis de Broglie
   - Paquet d'ondes

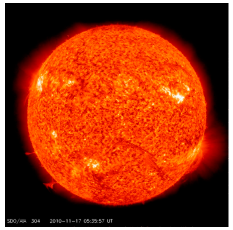
LE RAYONNEMENT DU CORPS NOIR

Introduit en 1862 par Kirchhoff, mesuré par Wien en 1887

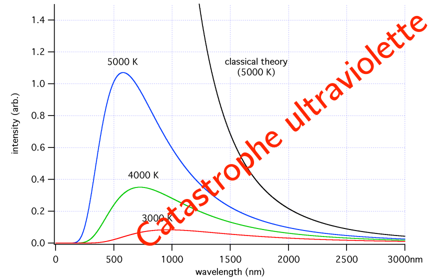
Lumière émise par un corps matériel quand il est en équilibre thermique à la température T

27 avril 1900, Lord Kelvin :

«La beauté de la théorie dynamique, qui pose que la chaleur et la lumière sont des modes de mouvement, est actuellement obscurcie par deux nuages…»



Exemple : la surface du soleil



PLANCK ET LES PREMIERS QUANTA

- Planck obtient en 1900 une formule empirique pour le rayonnement du coprs noir.
- Il est possible de trouver cette formule en faisant l'hypothèse suivante : *Les échanges d'énergie entre la matière et le rayonnement ne peuvent se faire que par des multiples d'une quantité discrète : le quantum d'action.*
- Il introduit alors la constante qui portera son nom : h ou $\hbar = h/2\pi$
- Les échanges d'énergie s'écrivent donc :

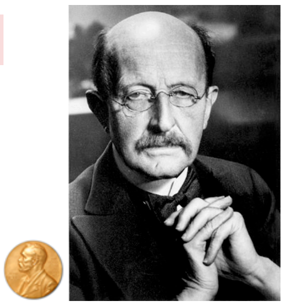
$$\Delta E = N h\nu = N\hbar\omega$$

- On a

$$h = 6.63\ 10^{-34}\ \text{Js}$$

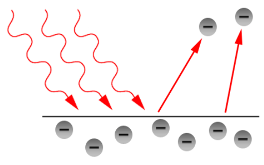
$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05\ 10^{-34}\ \text{Js}$$

1918



L'EFFET PHOTOELECTRIQUE

Découvert par Hertz 1887, étudié par Lenard (1899) et Millikan (1902)



1923

Effet d'une onde électromagnétique sur un matériau :
éjection des électrons pour une fréquence suffisament élevée

Expliqué par Einstein en 1905 : le rayonnement lui même est quantifié

NAISSANCE DU PHOTON (le nom date de 1926)

LES PHOTONS D'EINSTEIN

- Pour une lumière de pulsation ω et de vecteur d'onde $\vec{k}$ on a :

$$E = \hbar\omega$$

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad |k| = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Cela pose de nombreuses questions :

- Contradiction avec l'électromagnétisme (l'équation d'onde est continue)
- La lumière est elle une onde ou une particule ?
  Interférences avec des photons uniques (cf TD)

1921 

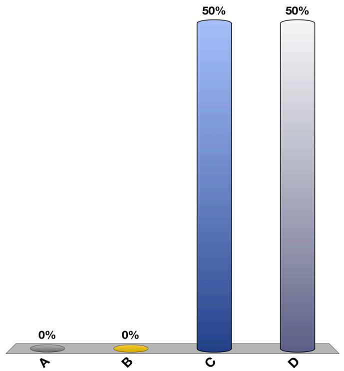
RETROUVE-T-ON LA DUALITE ONDE CORPUSCULE POUR UNE PARTICULE MATERIELLE (UN ATOME, UN ELECTRON...) ?

A. Non, une particule ayant une masse ne peut pas être une onde.

B. Seul les électrons peuvent être vus comme des ondes et des particules car ils sont isolés.

C. Tout le monde est une onde et une particule : même moi.

D. Je n'en sais rien

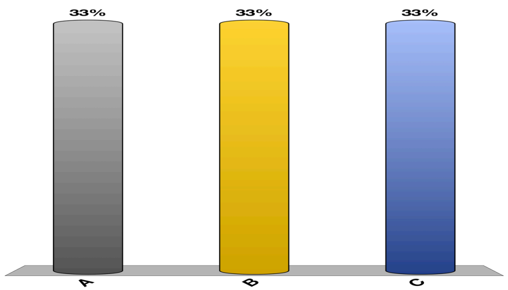


COMMENT DEFINIT ON LA LONGUEUR D'ONDE D'UNE PARTICULE MATERIELLE ?

A. L'impulsion $\lambda = \frac{h}{p}$ avec $p = mv$

B. La masse et le volume de la particule $\lambda = \dfrac{mV\nu}{\hbar}$

C. J'insiste, une particule ayant une masse ne peut pas être une onde...



L'HYPOTHESE DE LOUIS DE BROGLIE

- A toute particule de masse m et d'impulsion $p = mv$, on peut associer un vecteur d'onde et une longueur d'onde :

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar} \qquad \lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p}$$

Deux citations :

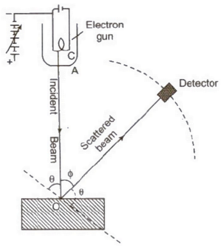
Einstein à Langevin, 1924 : «*Le travail de Louis de Broglie m'a grandement impressionné. Il a soulevé un coin du grand voile [...]. Si vous le voyez, veuillez lui témoigner toute mon estime et ma sympathie.*»

Maurice de Broglie, 1945 : « *C'est donc une véritable révolution de la pensée qui s'est opérée depuis vingt ans [...]. C'est un chambardement général, et vous en êtes grandement responsable.*»

1929 

LA PREUVE DES ONDES DE MATIERE

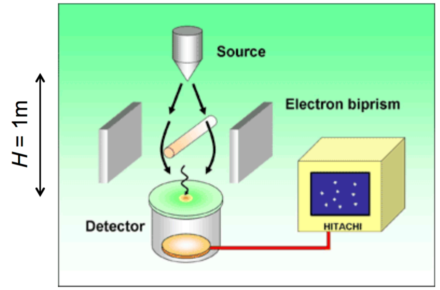
- Diffraction des électrons sur un cristal
  - Davisson et Germer & Thomson



- Interférences avec des électrons
  - A. Tonomura et son équipe Hitachi Research Laboratory
- Interférences avec des atomes
  - Voir TD

INTERFÉRENCES AVEC DES ÉLECTRONS

A. Tonomura et son équipe Hitachi Research Laboratory



énergie $E = 50$ keV
vitesse $v = 0.4$ c

10 électrons par seconde

filament de diamètre de l'ordre de 1μm

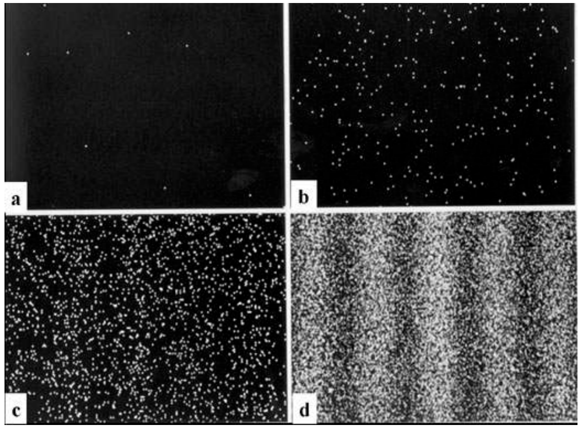
Similaire au biprisme de Fresnel

INTERFÉRENCES AVEC DES ÉLECTRONS

A. Tonomura et son équipe Hitachi Research Laboratory

INTERFÉRENCES AVEC DES ÉLECTRONS

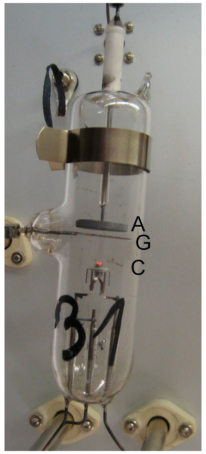
A. Tonomura et son équipe Hitachi Research Laboratory

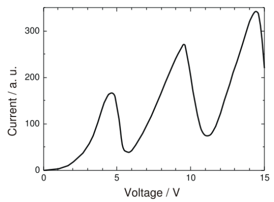


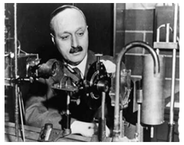
(a) 8; (b) 270; (c) 2000; (d) 160.000 électrons

EXPERIENCE DE FRANCK ET HERTZ

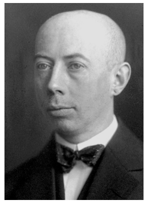
James Franck et Gustav Hertz 1914







1925



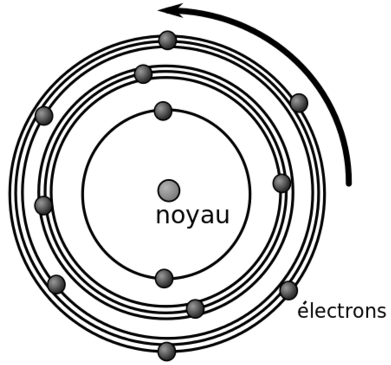
Ionisation des atomes de Mercure sous l'effet d'un jet d'électrons

Les atomes sont ionisés (détection d'un courant)
lorsque les électrons incidents ont une énergie de 4.9eV
Puis a nouveau pour a 9.8eV etc…

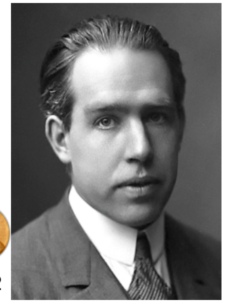
Structure des atomes !

MODELE DE BOHR DE L'ATOME

Modele de Bohr



1922



Les atomes absorbent et émettent de la lumière d'une manière discontinue.
Seules certaines longueurs d'ondes sont absorbées ou émises.

OU EN EST ON ?

- **Les Questions ?**
  - Rayonnement du corps noir
  - Effet photo-électrique
  - Spectre des atomes
  - L'expérience de Franck et Hertz
- **Les réponses :**
  - Quantification des échanges d'énergie (les quanta de Planck)
  - Quantification du rayonnement (les photons d'Einstein)
  - Quantification des niveaux d'énergie (les atomes de Bohr)
- **L'intuition géniale !**
  - Les ondes de matière de Louis de Broglie
  - La longueur d'onde de de Broglie

LA FONCTION D'ONDE

Le projet de la Mécanique :

1. Décrire l'état du système (lui donner une représentation mathématique).
2. Connaitre la loi d'évolution dans le temps (prévoir l'état du système à l'instant t, à l'aide des conditions initiales).
3. Etablir les lois pour calculer les résultats de mesures (passer de l'objet mathématique à la valeur mesurée).

En Mécanique Quantique on introduit la fonction d'onde :

$$\psi(\vec{r}, t)$$

La **description complète** de l'état d'une particule de masse **m** dans l'espace à l'instant **t** se fait au moyen d'une fonction d'onde **complexe.**

C'est une fonction continue des variables d'espace $\vec{r} = (x, y, z)$

LA FONCTION D'ONDE $\psi(\vec{r},t)$

Interprétation probabiliste de la fonction d'onde :

La probabilité de trouver une particule dans un volume élementaire d^3r entourant le point $\vec{r}$, au temps t est donnée par :

$$d^3P = |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r$$

Propriétés de la fonction d'onde

- C'est une fonction continue et de carré sommable $\mathscr{L}^2(\mathbb{R}^3)$
- Elle est normalisée à 1 sur l'ensemble de l'espace

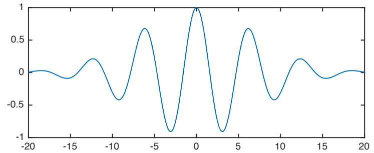
$$\int |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$$

- Deux fonctions différentes décrivent des états différents sauf si elles ne diffèrent que par un facteur de phase invariant en temps.

INTERPRETATION PROBABILISTE

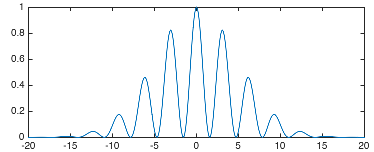
Amplitude de probabilité

$$\psi(\vec{r},t)$$



Densité de probabilité

$$|\psi(\vec{r},t)|^2$$

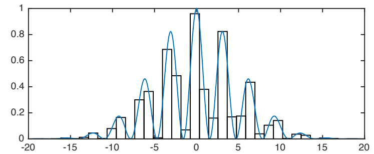


N mesures successives

On prépare successivement N fois la particule dans le même état initial.

En faisant N fois la même mesure, on peut reconstituer l'histogramme ci-contre.

Si N>>1, on a une bonne approximation de la fonction d'onde



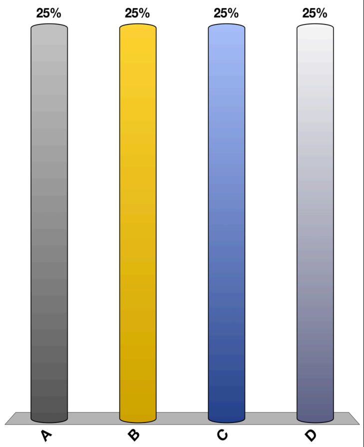
VALEUR MOYENNE - ESPERANCE

On vous fait la proposition suivante : Avec 2 dés, si vous faites un double, on vous donne **1 million d'euros** et sinon vous me donnez **10.000 euros.**

A. **Je joue : l'espérance est en ma faveur.**

B. **Je joue : même si l'espérance n'est pas en ma faveur.**

C. **Je ne joue pas c'est trop risqué !**



$$\frac{1\,000\,000}{36} - \frac{10\,000 \times 35}{36} = 18\,055$$

"Gain double 6" * P(double 6)
+ "Perte autre" * P(autre)

VALEUR MOYENNE – ESPERANCE

Pour une distribution discrète on a : $\langle x \rangle = \sum X P(X)$

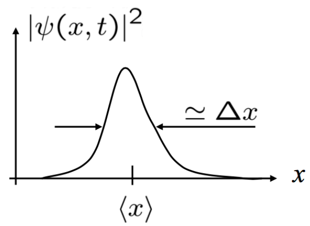
Lorsque l'on passe à la fonction d'onde continue, on a :

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

Et pour la variance :

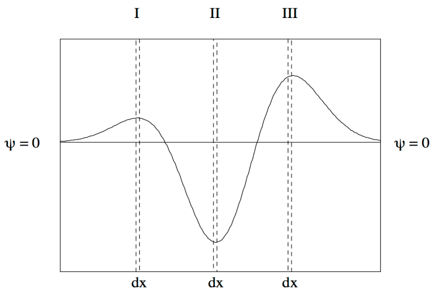
$$\Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

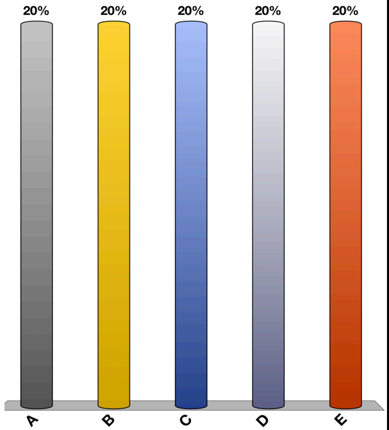
$$\langle x^2 \rangle = \int x^2 |\psi(x,t)|^2 dx$$



CLASSEZ LES PROBABILITÉS DE MESURER LA PARTICULE DÉCRITE PAR Ψ(X) DANS CES TROIS ZONES DE LA PLUS FORTE À LA PLUS FAIBLE.

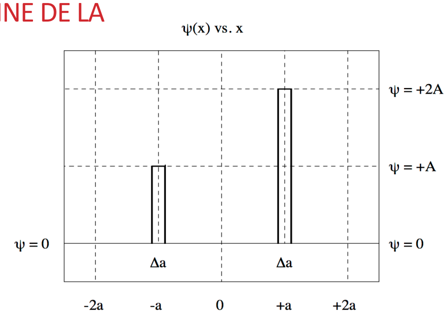
A. P(III)>P(I)>P(II)
B. P(II)>P(I)>P(III)
C. P(III)>P(II)>P(I)
D. P(II)>P(III)>P(I)
E. P(I)>P(II)>P(III)





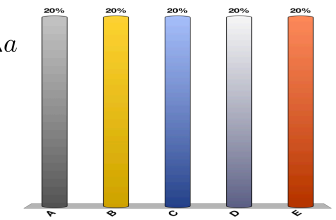
POUR LA FONCTION D'ONDE CI-DESSOUS QUELLE EST LA VALEUR MOYENNE DE LA VARIABLE POSITION ?

A. x = a
B. x = -a
C. x = 0
D. x = 3a/5
E. x = 4a/5



$$A^2\Delta a \times (-a) + 4A^2\Delta a \times (+a) = 3A^2\Delta a$$

Normalisation : $5A^2\Delta a = 1$



DESCRIPTION COMPLETE OU INCOMPLETE DE LA REALITE ?

«La description complète de l'état d'une particule de masse *m* dans l'espace à l'instant *t* se fait au moyen d'une fonction d'onde»

- La fonction d'onde contient **toute l'information disponible** : il n'y a pas d'autre élément dans le formalisme quantique qui pourrait permettre de savoir, avant de faire la mesure, ou`la particule va être détectée.
- Le caractère **probabiliste et aléatoire** ne résulte pas d'une mauvaise connaissance des conditions initiales (comme en théorie cinétique des gaz par exemple), mais fait partie intégrante du formalisme quantique.
- Einstein («Dieu ne joue pas aux dés») s'opposait à ce rôle central de l'aléatoire au sein de la théorie quantique.

Preuve théorique et expérimentale: inégalités de Bell, cours 12 et TD14

PRINCIPE DE SUPERPOSITION

Comme pour un champ électromagnétique :

- On manipule des amplitudes
- On mesure des intensités (module carré de l'amplitude)

La fonction d'onde est une amplitude de probabilité.

Si ψ_1 et ψ_2 sont deux fonctions d'onde possibles pour une particule, alors $\psi \propto \psi_1 + \psi_2$ est aussi une fonction d'onde possible.

La loi de probabilité pour ψ_1 est $P_1 = |\psi_1|^2$ et pour ψ_2 on a $P_2 = |\psi_2|^2$
La loi de probabilite pour $\psi \propto \psi_1 + \psi_2$ est :

$$P = |\psi|^2 \propto P_1 + P_2 + \psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*$$

Interférences quantiques !!!

ONDES DE DE BROGLIE

Revenons à l'expérience d'interférences avec des électrons de Tonomura.

Par analogie avec l'optique, on peut imaginer deux fonctions d'ondes qui s'aditionnent (en amplitude) pour créer des interférences.

Une onde plane EM s'écrirait : $\psi(\mathbf{r},t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{kr}-\omega t)}$

On a : $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ (de Broglie) et $\omega = \frac{E}{\hbar}$ (Einstein), on en déduit la forme des ondes de dB :

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{pr}-Et)/\hbar}$$

avec $E = \mathbf{p}^2/2m$

On a donc : $\frac{d\psi}{d\mathbf{r}} = \frac{i\mathbf{p}}{\hbar}\psi \qquad \frac{d\psi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\psi$

EVOLUTION TEMPORELLE DE LA FONCTION D'ONDE

On part de $\frac{d\psi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar}\psi$

On a : $i\hbar\frac{d\psi}{dt} = E\psi$

On a vu $\frac{d\psi}{d\mathbf{r}} = \frac{i\mathbf{p}}{\hbar}\psi$ soit $\mathbf{p}\psi = -i\hbar\frac{d\psi}{d\mathbf{r}}$

Multiplier par $\mathbf{p}$ revient à dériver par rapport à $\mathbf{r}$ et multiplier par $-i\hbar$
On dira que $\mathbf{p}$ est un opérateur noté $\hat{\mathbf{p}}$

Pour une particule libre : $E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$

Et donc : $$i\hbar\frac{d\psi(\mathbf{r},t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t)$$

Equation de Schrödinger pour une particule libre

RELATION DE DISPERSION

Equation de Schrödinger pour une particule libre $i\hbar\frac{d\psi(\mathbf{r},t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t)$

- On cherche **la relation de dispersion**, c'est à dire celle qui relie la fréquence (ou l'énergie) et le vecteur d'onde.

Rappel pour un photon (particule sans masse) : $\omega = ck$

Ici on a : $E = \hbar\omega = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ et $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$

On trouve donc : $\omega = \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m}$, la dispersion est quadratique en $\mathbf{k}$ et non plus linéaire comme poure une particule sans masse.

- **Vitesse de phase :** $v_\phi = \omega/\mathbf{k}$
  - Pour le photon dans le vide : $v_\phi = c$
  - Pour la particule massive : $v_\phi = \frac{\hbar k}{2m} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$
- **Vitesse de groupe (plus tard)**

CONSERVATION DE LA NORME

Equation de Schrödinger pour une particule libre $i\hbar\frac{d\psi(\mathbf{r},t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t)$

- On souhaite verifier que la norme est conservée par l'équation de Schrödinger. C'est essentiel pour garantir l'interpretation probabiliste.

A partir de $\frac{d\psi(\mathbf{r},t)}{dt} = i\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r},t)$ et sa conjuguée, on montre :

$$\frac{d}{dt}\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2 d^3r = 0$$

Solution :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int |\psi(\mathbf{r},t)|^2\, d^3r &= \int \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\, d^3r + \int \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\, d^3r \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\int \psi^*\,\Delta\psi\, d^3r - \int \Delta\psi^*\,\psi\, d^3r\right) = 0\end{aligned}$$

L'ONDE PLANE MONOCHROMATIQUE (L'ONDE DE DE BROGLIE) EST ELLE UNE FONCTION D'ONDE POSSIBLE ?

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_0 e^{i(\mathbf{pr}-Et)/\hbar}$$

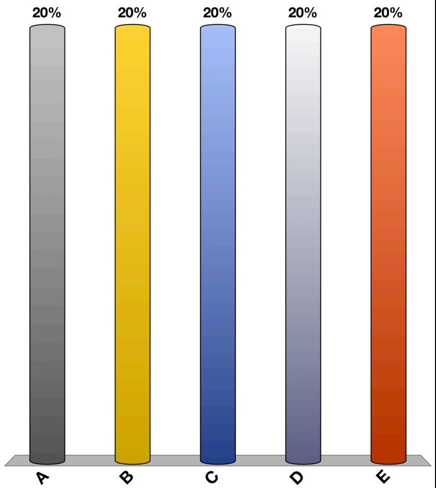
A. Oui, car c'est une solution de l'équation de Shrödinger.

B. Oui, car elle permet de relier l'énergie et l'impulsion.

C. Oui, car elle permet d'appliquer le principe de superposition.

D. Non, car elle ne peut pas être normalisée.

E. Non, car elle n'est pas continue sur tout l'espace.



PAQUET D'ONDES

- **L'onde plane monochromatique** (OPM) est un outil important en Physique, MAIS elle ne peut pas décrire une véritable fonction d'onde car elle **n'est pas normalisée**.
- Pour résoudre ce problème, on introduit le paquet d'onde. C'est une superposition linéaire à coefficients complexes d'OPM. En vertu du principe de superposition, si l'OPM est solution (non normalisable) de l'équation de Schrödinger, alors une superposition linéaire l'est aussi.
- Une somme discrète donne : $\psi(\mathbf{r},t) = \sum_{n=1}^{N} a_n e^{i(\mathbf{p_n r}-E_n t)/\hbar}$
- On utilisera plutot, une somme continue :

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\mathbf{p}) e^{i(\mathbf{pr}-Et)/\hbar} d^3p$$

On remarque que : $\varphi(\mathbf{p})e^{-iEt/\hbar}$ est la TF de $\psi(\mathbf{r},t)$ (et vice-versa)

CONCLUSION

On a vu :

- Les fondements théoriques et éxperiementaux de la Mécanique quantique.
- La notion de fonction d'onde : déscription COMPLETE d'un système physique.
- L'équation de Shrödinger qui donne l'évolution de la fonction d'onde au cours du temps
- Les solutions de l'équation de Shrödinger (pour une particule libre) qui sont les ondes de De Broglie et toutes superpositions de celles-ci : les paquets d'onde
- Le rôle joué par la transformée de Fourier (on y reviendra)