
COURS DE MECANIQUE QUANTIQUE **ET RELATIVITE RESTREINTE**

Sommaire

- **Introduction Générale**
- **Introduction aux Concepts de la Mécanique Quantique**
- **Equation de Schrödinger**
 - Formalisme fondamental de la Mécanique Quantique
 - Postulats de la Mécanique Quantique
 - Oscillateurs Harmoniques
- **Relativité Restreinte**

Avant Propos

La mécanique quantique se présente comme étant un ensemble de postulats et de principes permettant de décrire le monde microscopique (molécule, atome et noyau). Elle a vu le jour lorsque la physique classique a connu un échec manifeste pour décrire certaines propriétés de l'interaction matière-rayonnement.

Depuis sa naissance, la mécanique quantique a connu un grand succès dans la description de la structure de la matière et aucune contradiction n'a été décelée entre ses prédictions et les tests expérimentaux. Néanmoins, elle reste une discipline difficile à aborder par l'apprenti. En effet, cette difficulté est due d'un côté à la nature microscopique des phénomènes que la mécanique quantique tente d'élucider ; et d'un autre côté, au formalisme mathématique abstrait sur lequel elle est basée.

Introduction Générale

La mécanique quantique est le traitement physique des phénomènes naturels microscopiques. La théorie quantique est complète : elle est aussi bien valable dans le domaine macroscopique (domaine des grandes distances) que dans le domaine microscopique (domaine des courtes distances).

A la fin du 19^{ème} siècle, les objets physiques qui constituent l'univers étaient classés en deux catégories : la matière et le rayonnement.

- 1- La matière est faite de particules assimilables à des points matériels, ayant d'une masse, auxquels s'appliquent les lois de la mécanique classique. Cette mécanique s'applique correctement aux corps célestes, aux solides de dimensions macroscopiques ainsi qu'à la théorie cinétique des gaz.*
- 2- Le rayonnement est constitué par des ondes électromagnétiques qui se propagent selon les fameuses équations de Maxwell.*

Tous les phénomènes physiques, comme par exemple l'optique géométrique et les interférences, connus à l'époque, trouvaient leur explication dans cette théorie de Maxwell. Les ondes radioélectriques, découvertes par Hertz, montrent la parfaite concordance entre l'optique et l'électricité.

Vers le début du 20^{ème} siècle, deux grands problèmes se posaient :

- * Comment déduire de la théorie électromagnétique les lois du mouvement des particules chargées ?*
- * Les expérimentateurs se trouvaient confrontés à un certain nombre d'énigmes que les théories utilisées à l'époque ne leur permettaient pas de résoudre telles que le rayonnement du corps noir, l'effet photoélectrique ...*

Ces expériences portent sur l'interaction de la lumière avec la matière que la théorie classique paraissait incomplète.

Ce fût le physicien Max Planck (1900) qui jeta les bases de la mécanique quantique (L'origine du mot quantique vient du Grec quantum qui désigne une quantité élémentaire). Avant Planck, les physiciens voyaient le monde et la nature sous forme de continuum. Les quantités physiques telles que l'énergie, la quantité de mouvement, le moment cinétique ...) étaient des grandeurs continues pouvant prendre n'importe quelles valeurs.

Fondamentalement, l'hypothèse de Planck revient à substituer à cette vision continue du monde, une vision discontinue. Mais la discrétisation de quantités physiques se fait par sauts si minimes que le caractère discontinu du monde ne peut être perçu par nos sens.

Dans ce document, le premier chapitre est réservé à une analyse des diverses expériences ayant conduit à la naissance de la mécanique quantique à savoir le problème du corps noir, l'effet photoélectrique et l'effet

Compton. Le deuxième chapitre est dédié aux applications de la mécanique quantique, particulièrement les problèmes à une dimension (Résolution de l'équation de Schrödinger, puits de potentiel). Le troisième et le quatrième chapitre sont consacrés au formalisme mathématique et aux postulats de la mécanique quantique où l'on évoque les définitions et les théorèmes relatifs à l'espace des états, aux opérateurs hermitiques, aux observables ainsi que l'ensemble complet d'observables qui commutent. Enfin, l'étude de l'oscillateur harmonique achève cette étude.

Introduction aux Concepts de la Mécanique Quantique

Du particulière à l'ondulatoire

Après de nombreuses théories au sujet de la lumière, le Britannique Isaac NEWTON (1642 – 1727) impose son modèle de la lumière au XVII^e siècle. Pour lui, il s'agit d'un jet de particules qui diffèrent suivant la couleur de la lumière. On parle de <<modèle particulaire>>. Cependant, ce modèle ne permet pas d'expliquer les phénomènes d'interférences.

Pour les interpréter, le modèle ondulatoire est élaboré au XIX^e siècle à la suite des travaux du Britannique Thomas YOUNG (1773-1829) et du Français Augustin FRESNEL (1788-1827). Très vite, ce modèle prédomine pour atteindre son apogée en 1864 avec les travaux de l'Ecossais James MAXWELL (1831-1879).

Pourtant, à la fin du XIX^e siècle, la découverte de l'effet photoélectrique (métal éclairé par un rayonnement), par l'Allemand Heinrich HERTZ (1857-1894), ne peut s'expliquer par le caractère ondulatoire de la lumière. En 1905, pour expliquer cet effet, Albert EINSTEIN (1879-1955) postule qu'un rayonnement est constitué de particules transportant des quanta d'énergie. En 1926, l'Américain Gilbert LEWIS (1875-1946) les nomme <<photons>>.

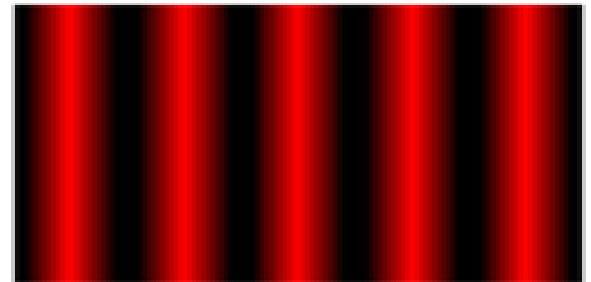
La dualité onde - particule

Actuellement, suite aux travaux du Français Louis De BROGLIE (1892-1987) en 1923, la lumière, et plus généralement les ondes électromagnétiques, sont décrites comme des flux de photons. Un photon se comporte soit comme une onde, soit comme une particule, suivant le contexte expérimental considéré. On parle de dualité onde – particule.

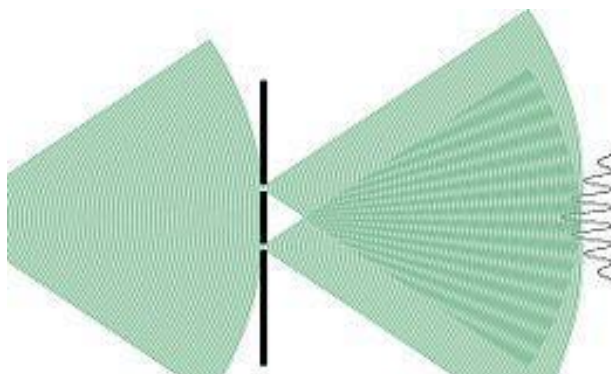
En 1921, A. EINSTEIN reçoit le prix Nobel de Physique pour ses travaux sur l'effet photoélectrique. En 1929, L. DE BROGLIE le reçoit pour sa découverte de la nature ondulatoire des électrons.

De la dualité onde – particule à l'aspect probabiliste de la mécanique quantique

*Le phénomène d'interférences est expliqué par le caractère ondulatoire de la lumière. L'expérience des fentes d'Young en est une illustration. On observe sur le document 1 des interférences constructives représentées par des franges brillantes et des interférences destructives repérées par des franges sombres.

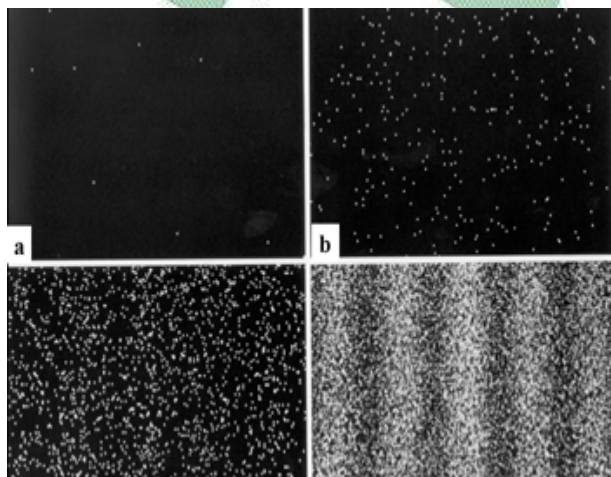


Document 1 : Figure d'interférences



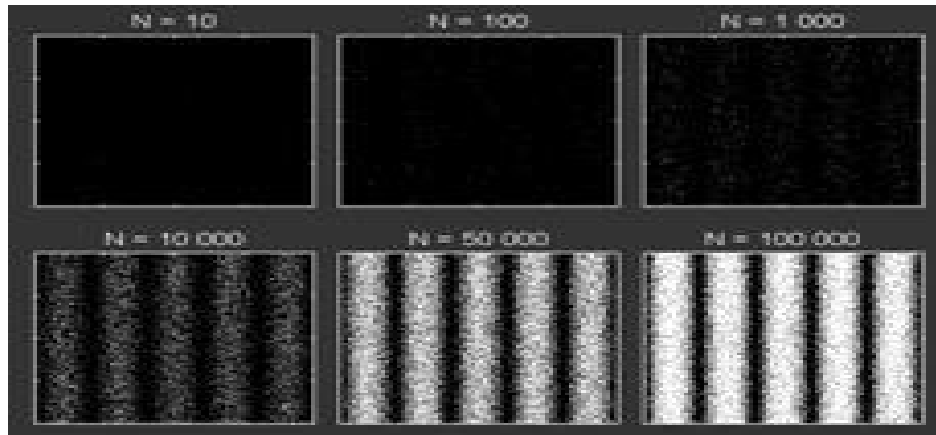
*L'expérience des fentes d'Young consiste à envoyer sur une plaque percée de deux fentes parallèles une onde électromagnétique, de longueur d'onde dans le vide λ , issue d'une source lumineuse. En diminuant suffisamment l'intensité lumineuse de la source, on peut considérer que les photons sont émis un par un.

On enregistre au cours du temps la position de l'impact de chacun des photons sur un capteur, après la traversée des fentes d'Young.



Pour une durée d'expérience très longue, le nombre de photons détectés est grand. Le résultat est représenté sur le document 2. Chaque point blanc représente l'impact d'un photon. On distingue des zones brillantes (là où beaucoup d'impacts se produisent) qui alternent avec des zones sombres (là où peu d'impacts se produisent même après une longue durée d'expérience). Cette figure est comparable à celle obtenue avec une source lumineuse monochromatique.

Document 2 : Figure d'interférences obtenue avec des fentes d'Young bombardées photon par photon



Document 3 : Figure d'interférences électron par électron

Si on procède de manière similaire, mais en envoyant des particules de matière, de masse non nulle, telle que des électrons, on observe une distribution identique à celle obtenue avec les photons (Document 3). Les premiers impacts semblent être désordonnés, puis, lorsque leur nombre augmente, ils se répartissent de manière plus organisée. Tous les électrons sont émis dans les mêmes conditions, mais sont détectés en des points différents.

Dans ce type d'expériences, on est incapable de reconstituer la trajectoire de la particule (photon ou électron) puisqu'on ne sait pas par quelle fente elle est passée.

Si on réalise l'expérience en fermant alternativement l'une ou l'autre des fentes, on n'observe plus de figure d'interférences, mais une distribution d'impacts centrée sur l'une ou l'autre des fentes.

Cela a permis de mettre en évidence l'aspect probabiliste des phénomènes quantiques.

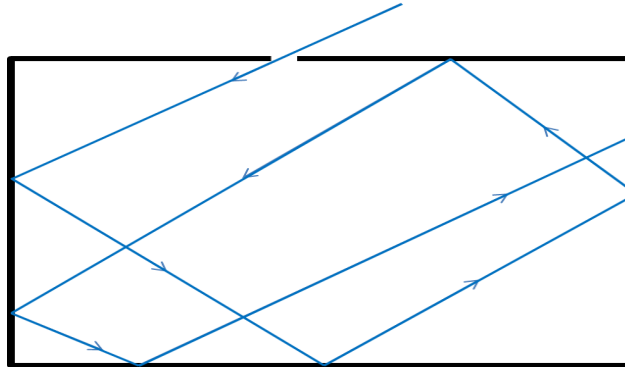
I. CARACTERE CORPUSCULAIRE DU RAYONNEMENT ELECTROMAGNETIQUE.

Divers faits expérimentaux ont montré que le rayonnement électromagnétique (E. M.) dont le caractère ondulatoire est pourtant bien établi, se comporte parfois comme s'il était composé de particules appelées " photons ". Trois de ces phénomènes ont joué un rôle historique important en physique.

1- Rayonnement du corps noir

" Un corps noir est un objet qui absorbe intégralement tout rayonnement incident qui frappe sa surface ". On peut constituer un corps noir en utilisant une enceinte imperméable aux rayons lumineux, portée à une température élevée et qu'un corps porté à haute température émet un rayonnement lumineux. La capacité d'un corps à rayonner est étroitement liée à sa capacité à absorber le rayonnement. Les radiations qui entrent dans l'enceinte se réfléchissent sur les parois et s'absorbent plus ou moins à chaque réflexion (document 4).

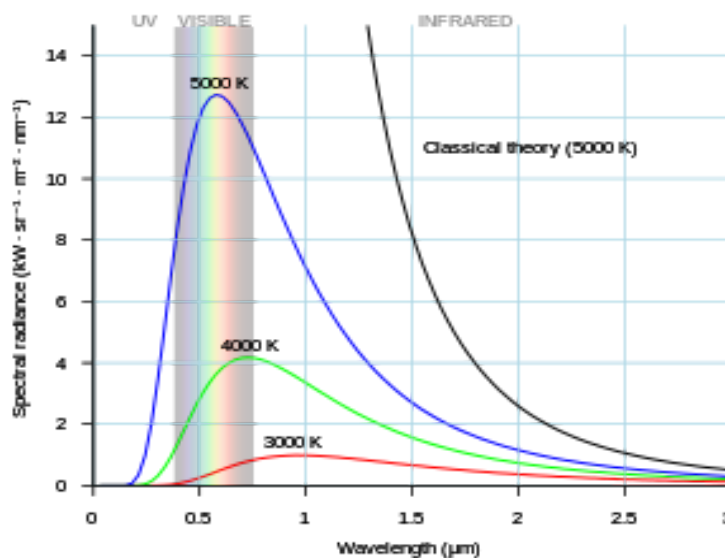
Rayonnement incident



Document 4 : Réalisation pratique d'un corps noir

Le rayonnement thermique est émis par les corps en raison de leur seule température. Le corps noir entièrement absorbant pour les ondes E. M. qu'il reçoit, est aussi le corps dont le pouvoir émissif est le plus grand à une température donnée.

La courbe expérimentale (document 5) obtenue par l'étude du rayonnement émis nous permet de mesurer la densité d'énergie μ en fonction de la longueur d'onde λ . Cette courbe expérimentale montre que l'émittence augmente avec la température et que pour une température donnée, elle présente un maximum pour une valeur λ_m . Ce maximum se déplace vers les grandes longueurs d'onde lorsque la température diminue.



Document 5 : Densité d'énergie rayonnée par le corps noir pour différentes températures

- Autres résultats expérimentaux :

- 1) Loi de Stéfán : la puissance électromagnétique totale rayonnée par l'unité de volume du corps noir est proportionnelle à la 4^{ème} puissance de la température de celui-ci :

$$P(T) = \int_0^{+\infty} E_T(\nu) d\nu = \sigma T^4 ; \sigma \text{ est la constante de Stéfán.}$$

- 2) Loi de Wien : le maximum du rayonnement du corps noir se produit à la température T pour une longueur d'onde : $\lambda_0 = \frac{c}{\nu_0} = \frac{2,9}{T} \text{ (mm)}$

a/ Loi de Rayleigh-Jeans

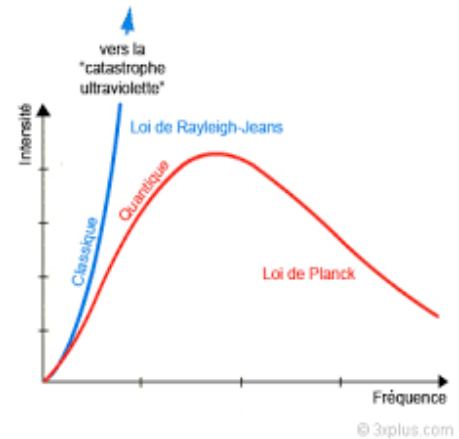
En 1900, Rayleigh et Jeans ont postulé que le rayonnement E. M. émis est dû à un ensemble d'oscillateurs formant le corps noir et ont montré que l'émission (densité d'énergie) est donnée par la relation suivante :

$$E_T(\nu; T) = \frac{8\pi k_B T}{c^3} \nu^2 ;$$

ν : fréquence ; T : température ; k_B : constante de Boltzman.

Cette formule n'est manifestement pas en accord avec l'expérience.

Elle est tout au plus une approximation aux faibles fréquences (grandes longueurs d'ondes). Cette formule accorde une contribution infinie pour des fréquences qui tendent vers l'infini. Non seulement cette loi ne prédit pas l'existence d'un maximum d'intensité à une fréquence donnée mais en plus elle conduit à une énergie totale infinie. C'est ce que l'on appelle la catastrophe ultraviolette, qui rend l'interprétation classique du rayonnement du corps noir inacceptable.



b/ Loi de Planck :

Le 14 Décembre 1900, Max Planck expose son interprétation théorique du rayonnement du corps noir. Il modifie les hypothèses de Rayleigh et Jeans en admettant qu'à une fréquence donnée, les échanges d'énergie ne portent que sur des entiers de quanta d'énergie, chacun valant $E = h \nu$ où h est la constante de Planck. Autrement dit, il suppose que les échanges d'énergie électromagnétique ne sont pas divisibles à l'infini mais en plus que l'énergie de ces paquets élémentaires dépend de la fréquence du rayonnement.

En mécanique classique, toutes les énergies sont permises alors qu'en mécanique quantique l'énergie est quantifiée.

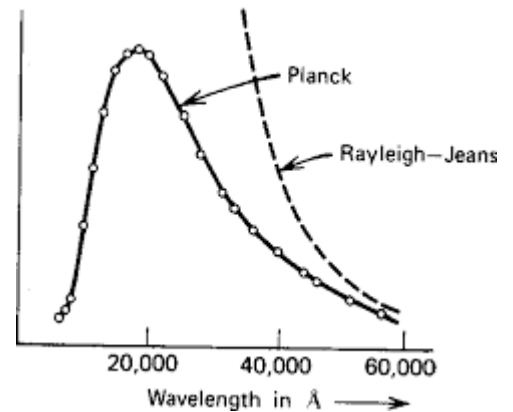
A partir de là, Planck a montré que l'énergie émise est donnée par la relation :

$$E_p^T(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} ; \quad k_B = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot (\text{°K})^{-1} ; \quad h = 6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

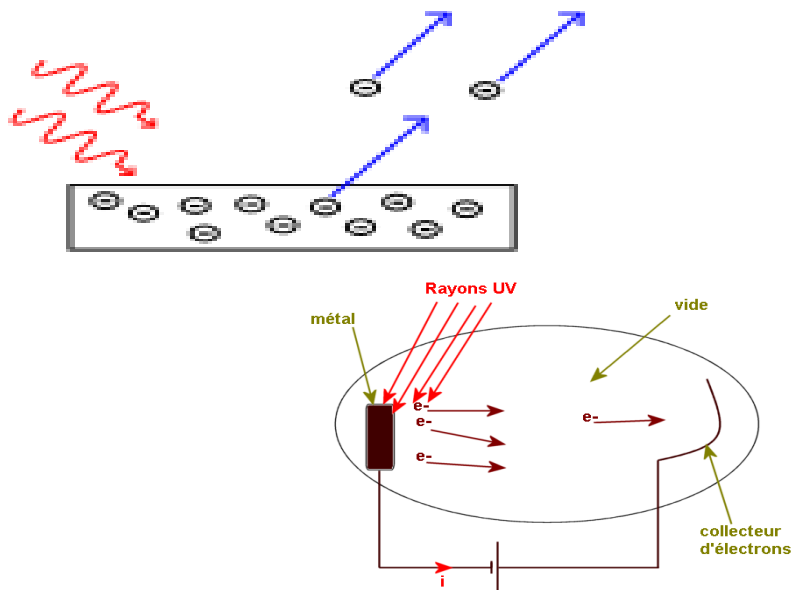
Si $h\nu \ll k_B T$ alors $E(\nu; T) = \nu^2 k_B T$, on retrouve la loi de Rayleigh-Jeans.

Si $h\nu \gg k_B T$ alors $E(\nu; T) = h^2 \nu^3 \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right)$, on retrouve la loi de Wien.

Cette densité d'énergie tend bien vers 0 quand la fréquence tend vers l'infini, vaut 0 à fréquence nulle et le maximum se déplace vers les hautes fréquences (courtes longueurs d'ondes) lorsque la température augmente. D'autre part, la formule de Planck contient celle de Rayleigh et Jeans, qui n'en est qu'une approximation à basse fréquence.



2- Effet photoélectrique:



L'effet photoélectrique concerne l'interaction entre le rayonnement et la matière à l'échelle microscopique. L'idée de l'expérience est d'envoyer de la lumière sur une plaque de métal (cathode) pour en arracher des électrons. Ces électrons peuvent ensuite être collectés par une anode afin de mesurer le courant d'électrons arrachés.

Au cours de ses expériences sur l'effet photoélectrique, P. Lénard a fait les observations suivantes:

- 1- il existe un " seuil en fréquence" ν_0 , en dessous duquel on n'observe pas d'arrachement d'électrons.
- 2- pour une fréquence $\nu > \nu_0$, le nombre d'électrons arrachés dépend de l'intensité du faisceau incident, leur énergie reste inchangée.
- 3- A intensité constante, si on augmente la fréquence, seule l'énergie cinétique maximale des électrons émis varie, leur nombre reste constant. Pour avoir l'effet photoélectrique, on a besoin d'une énergie minimale qui permet d'ioniser le métal pour lui arracher l'électron : c'est le seuil photoélectrique.

De plus l'énergie cinétique maximale est reliée à la fréquence ν par :

$$E_{\text{cmax}} = \frac{1}{2} mV^2 = h\nu - h\nu_0 ; \quad \text{avec } \nu > \nu_0$$

Ces observations expérimentales sont incompréhensibles si l'on admet que l'énergie est uniformément répartie dans l'onde (théorie de l'E.M).

Einstein a pu interpréter ces faits expérimentaux en faisant l'hypothèse que la lumière est constituée de corpuscules appelés photons, transportant chacun l'énergie $E = h\nu$ où ν est la fréquence de l'onde électromagnétique (OEM), chaque photon, de masse nulle et de vitesse c , d'impulsion $p = h\nu/c = h/\lambda$,

interagit avec un seul électron et lui communique une partie de son énergie sous forme d'énergie cinétique maximale, l'autre partie ayant servi à l'arracher du métal.

Pour extraire les électrons d'un métal, il faut fournir une énergie $h\nu > W_{\text{ext}} = h\nu_0$ où W_{ext} est l'énergie d'extraction, l'énergie nécessaire pour arracher un seul électron.

L'excès d'énergie porté par le photon est transformé en énergie cinétique de l'électron :

$$E = h\nu = W_{\text{ext}} + \frac{1}{2} m v_e^2$$

3- Effet Compton

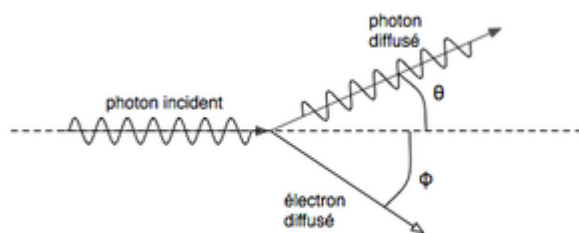
" C'est la diffusion de photons de rayons X par les électrons périphériques des atomes ".

Partant du principe que la lumière est constituée de particules possédant une énergie et une quantité de mouvement, Compton-Debye établirent chacun de son côté la loi théorique de la diffusion de photons par l'électron. Compton réalisa l'expérience et confirma les prédictions effectuées sur la base d'une hypothèse corpusculaire de la lumière.

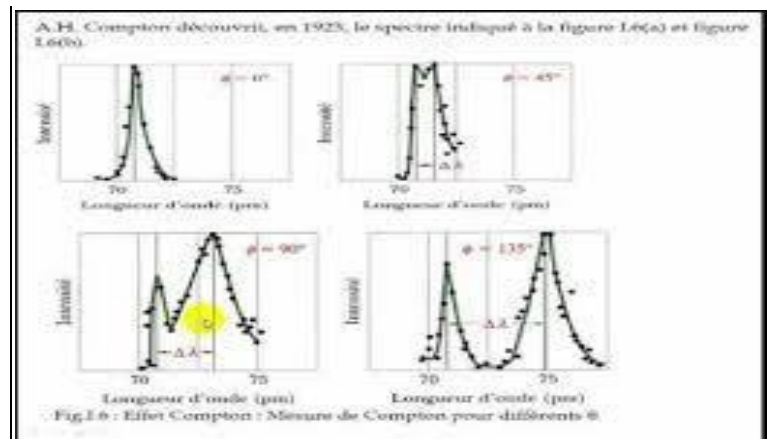
Principe :

On envoie un faisceau de RX (photon) de longueur d'onde λ sur une cible solide ou un électron supposé libre et au repos.

Après choc élastique, le photon diffusé de longueur d'onde λ' se propage dans une direction faisant l'angle θ avec l'horizontale et l'électron se déplace avec une vitesse v faisant l'angle ϕ avec l'horizontale. On observe que : $\lambda' > \lambda$; λ' dépend de la valeur de l'angle θ .



Diffusion Compton: Collision d'un photon avec un électron au repos



Interprétation:

	photon incident é avant collision		photon diffusé é après collision	
Impulsion	$\frac{h}{\lambda}$	0	$\frac{h}{\lambda'}$	p
Energie	hν	mc ²	hν'	$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$

En appliquant les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement, on obtient les relations suivantes :

- 1) $\vec{P}_0 + \vec{0} = \vec{P}_0' + \vec{p}$ conservation de la quantité de mouvement
- 2) $h\nu + mc^2 = h\nu' + E$ conservation de l'énergie

Par projection sur les axes ox et oy , on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{h\nu}{c} = h\frac{v'}{c}\cos\theta + p\cos\varphi \\ \text{et} \\ 0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\theta - p\sin\varphi \end{array} \right.$$

Ce qui nous permet d'écrire:

$$\begin{aligned} &\left\{ \begin{array}{l} pc\cos\varphi = h\nu - h\nu'\cos\theta \\ pc\sin\varphi = h\nu'\sin\theta \end{array} \right. \text{ en élevant au carré,} \\ &p^2c^2 = h^2(v^2 - 2vv'\cos\theta + v'^2) \\ &(2)^2 \Rightarrow p^2c^2 = h^2(v^2 - 2vv' + v'^2) + 2mc^2h(v - v') \\ &\Leftrightarrow h\nu v'(1 - \cos\theta) = mc^2(v - v') \\ &\frac{h}{\lambda\lambda'}(1 - \cos\theta) = mc\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = mc\frac{(\lambda' - \lambda)}{\lambda\lambda'} \\ &\Rightarrow \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \\ &\frac{h}{mc} = \lambda_c \quad \text{longueur d'onde compton } \lambda_c = 0,024\text{\AA} \\ &\lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta) \end{aligned}$$

Analyse classique : du point de vue de l'électromagnétisme classique, les rayons X sont décrits par une onde électromagnétique de longueur d'onde λ et de fréquence ν . Au passage de cette onde, les électrons liés aux atomes se mettent à vibrer autour de leurs orbites à la fréquence ν . Ceci conduit à l'émission d'ondes électromagnétiques à la fréquence ν dans toutes les directions. On comprend ainsi que du rayonnement soit diffusé dans toutes les directions. Malheureusement, ceci se fait sans changement de longueur d'onde et ne permet donc pas de rendre compte des résultats expérimentaux.

Analyse quantique : Elle repose sur le concept de collision photon-électron. L'énergie d'extraction des électrons étant tellement faible devant celle des rayons X, on peut considérer que tout se passe comme si les électrons étaient libres au départ. D'autre part, l'énergie qui va leur être communiquée est telle que l'on peut également les considérer comme immobiles (avant le choc).

$\lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$, cette formule est en parfait accord avec l'expérience.

Remarque : Quelle est la différence avec l'effet photoélectrique ?

Dans l'effet photoélectrique, l'expérience semble être la même à l'exception que la lumière envoyée est proche du visible. Les photons ont donc une énergie bien moindre et peuvent la céder entièrement aux

électrons et disparaître. Ici, ils n'en donnent qu'une partie et sont diffusés, pourquoi ? En fait, ils sont tellement énergétiques que s'ils donnaient leur énergie, les électrons dépasseraient la vitesse de la lumière, ce qui est interdit par la relativité restreinte. Ainsi, à partir d'une certaine fréquence, l'effet photoélectrique laisse place à l'effet Compton.

4- Relation de Louis de Broglie

Par analogie avec la relation de Planck-Einstein, L. de Broglie propose d'associer à toute particule de masse m , se déplaçant avec la vitesse v , une longueur d'onde λ telle que :

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$$

Ceci permet, encore une fois de traduire la dualité onde-corpuscule (double nature de la lumière):

$$\lambda = \frac{h}{p} \Leftrightarrow \omega = \frac{E}{\hbar} \quad \text{avec} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\Leftrightarrow k = \frac{p}{\hbar}$$

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad ;$$

5- Comportement ondulatoire de l'électron (modèle atomique de Bohr)

Position du Problème :

Au début du siècle, les physiciens admettent que, dans l'atome, les électrons (négatons) gravitent autour du noyau dont la charge positive est égale et de signe opposé à la somme des charges des négatons. Dans son état normal, l'atome est donc électriquement neutre. Décrivant des orbites autour du noyau, le négaton est animé d'un mouvement périodique; donc si les lois de l'électromagnétisme lui sont applicables, cette particule chargée doit créer un champ électromagnétique qui transporte de l'énergie vers l'extérieur. L'énergie du négaton doit donc décroître et avec elle le rayon de l'orbite. Par la suite, les électrons devraient tomber sur le noyau et dans ces conditions l'atome serait instable.

D'autre part, dans la théorie précédente, rien ne permet de prévoir un spectre de raies, c.-à-d. une discontinuité dans l'émission des radiations lumineuses. Au contraire, au champ E.M. qui a son origine dans le mouvement périodique du négaton correspond une radiation lumineuse visible ou non. Si le rayon de l'orbite diminuait de manière continue, la fréquence de la radiation émise varierait elle aussi de façon continue et donnerait lieu à un spectre continu et non à un spectre de raies comme cela est observé pour l'atome d'hydrogène.

Définition du modèle de Bohr :

La discontinuité dans l'émission lumineuse de l'hydrogène soumis à une décharge électrique poussa Niels Bohr à développer un modèle atomique se traduisant par les deux postulats suivants :

1^{er} Postulat : L'atome ne peut exister de manière permanente, que dans un certain nombre d'états correspondants à une valeur bien déterminée de l'énergie $\{E_0, E_1, E_2, \dots\}$. Il existe d'autre part un état d'énergie minimale appelé état fondamental, qui assure la stabilité de l'atome, les autres étant appelés états excités.

2^{ème} Postulat : Lorsque l'électron passe d'une orbite à une autre, l'énergie de l'atome subit une variation brusque et s'accompagne de l'émission (ou absorption) d'un photon d'énergie : $E_j - E_i = h\nu_{ji}$

Quantification de Bohr :

Une onde stationnaire, sur une corde fixée à ses deux extrémités ne peut inclure que certaines longueurs d'ondes. Par analogie, supposons que l'onde associée à un électron est une onde stationnaire lorsqu'il gravite autour du noyau. Il ne peut exister qu'un nombre entier de longueurs d'ondes, sur une corde circulaire; en effet, un nombre impair de demi-longueurs d'onde sur un cercle, donne une figure irrégulière. Donc, pour qu'il existe une onde stationnaire sur un cercle de rayon r , il faut que :

$$n \lambda = 2\pi r \quad \text{avec } n \text{ un entier}$$

D'autre part, on sait que : $mV = p = h/\lambda$ (relation de De Broglie) ;

$$(2\pi mVr = n h ; \quad mVr = n\hbar \quad \text{avec } \hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{Quantification du moment cinétique de l'électron } \vec{L} = \vec{r} \wedge \vec{p})$$

$$\text{D'où} \quad m^2 V^2 = n^2$$

Il en ressort alors : $mV^2 = n^2$ condition de quantification de Bohr

L'entier naturel n est appelé nombre quantique principal.

Orbites stables (stationnaires) :

Rayon de Bohr : Décivant une trajectoire circulaire à la vitesse V autour du noyau, le négaton est soumis à la force centrifuge : $f_1 =$

D'autre part, ce même négaton est maintenu sur orbite grâce à la force électrostatique f_2 telle que : $f_2 = f_1 =$

On a donc : $=$; d'où $mV^2 =$

En utilisant la relation de quantification de Bohr, on obtient : $r = n^2$

$r = a_0 n^2$ où a_0 est une constante appelée rayon de Bohr. Pour $n = 1$, $r_1 = 0.53 \text{ \AA}$

Energies permises :

L'énergie cinétique du négaton est : $E_c = mV^2 =$

Son énergie potentielle est : $E_p = = = - = -2 E_c$

L'énergie totale du négaton, E , est donnée par : $E = E_c + E_p$,

$E = - E_c = -$; en remplaçant r par son expression quantifiée,

On obtient : $E_n = - =$ avec $E_1 = - 13,6 \text{ eV}$

A chaque valeur du nombre quantique principal n correspond un niveau d'énergie appelé couche :

au niveau $n = 1$	correspond la couche	K
au niveau $n = 2$	correspond la couche	L
au niveau $n = 3$	correspond la couche	M
au niveau $n = 4$	correspond la couche	N
au niveau $n = 5$	correspond la couche	O
au niveau $n = 6$	correspond la couche	P

Lorsqu'un électron passe d'un niveau inférieur n_1 à un niveau supérieur n_2 , la variation de l'énergie de l'atome s'exprime par : $E_{n_1} - E_{n_2} = h\nu_{12} = hc/\lambda_{12} = - E_1 (-)$

$$1/\lambda_{12} = c R_H (-) ; R_H \text{ étant la constante de Rydberg ; } R_H = \frac{mK^2 e^4}{4\pi ch^3}$$

A cette variation d'énergie correspond une série de radiations lumineuses. Selon la valeur du niveau inférieur, on distingue différentes séries de rayonnements :

pour $n_1 = 1$ et $n_2 \geq 2$, on a la série de Lyman,
pour $n_1 = 2$ et $n_2 \geq 3$, on a la série de Balmer,
pour $n_1 = 3$ et $n_2 \geq 4$, on a la série de Paschen,
pour $n_1 = 4$ et $n_2 \geq 5$, on a la série de Bracket.

II. PHYSIQUE CLASSIQUE OU PHYSIQUE QUANTIQUE

En mécanique, la vitesse de la lumière c est la constante universelle qui permet de délimiter le domaine « non relativiste » du domaine « relativiste » : lorsque les vitesses envisagées dans un problème sont petites par rapport à c , un traitement « non relativiste » est suffisamment précis, par contre, dans le cas où ces vitesses se rapprochent de c , un traitement « relativiste » est alors nécessaire.

On peut se demander alors s'il existe une constante universelle qui jouerait un rôle analogue pour fixer un critère d'applicabilité de la mécanique quantique. Cette constante est incontestablement la constante de

Planck h . La dimension de h peut être déterminée à partir de la relation $E = h\nu$.

$[h] = [\text{temps}] [\text{énergie}] = [\text{longueur}] [\text{quantité de mouvement}] = M L^2 T^{-1}$, une telle grandeur s'appelle une action (quantum d'action). Il est également utile de remarquer que : $[h^2] = [\text{énergie}] [\text{masse}] [\text{longueur}]^2$

Si dans un système physique, une quelconque grandeur ayant les dimensions d'une action prend une valeur numérique de l'ordre de celle de la constante de Planck h , le comportement du système doit être décrit dans le cadre de la mécanique quantique.

Si au contraire, une grandeur physique homogène à une action a une valeur très grande par rapport à h , les théories classiques sont largement suffisantes pour comprendre les phénomènes qui se produisent.

	$v \ll c$	$v \gg c$
$d \gg h$	mécanique classique non relativiste	mécanique classique relativiste
$d \ll h$	mécanique quantique non relativiste	Mécanique quantique relativiste

Equation de Schrödinger

I- Introduction

Par analogie avec les champs électrique et magnétique qui décrivent les ondes électromagnétiques, nous avons introduit la fonction d'onde pour décrire les ondes de matière de De Broglie.

Une fonction d'onde est une fonction réelle ou complexe à variables réelles (les coordonnées spatiales et le temps). Elle sera notée $\psi(\vec{r}, t) = \psi(x, y, z, t)$ dans le cas tridimensionnel et $\psi(x, t)$ dans les problèmes à une dimension. Elle doit contenir toutes les informations sur l'onde de matière et donc sur la particule correspondante : elle détermine l'état physique de la particule.

II- Notions de la fonction d'onde

La description quantique des particules se fait par l'intermédiaire d'une fonction $\psi(\vec{r}, t)$ qui contient toutes les informations sur la particule. $\psi(\vec{r}, t)$ est appelée fonction d'onde (onde associée à la particule). C'est une fonction complexe.

$$\begin{aligned}\psi(\vec{r}, t) : (IR^3, IR) &\rightarrow \mathbb{C} \\ (\vec{r}, t) &\rightarrow \psi(\vec{r}, t)\end{aligned}$$

a- Probabilité de présence :

La probabilité de localiser la particule dans un élément de volume dv à l'instant t est donnée par la relation :

$$\begin{aligned}dp(\vec{r}, t) &= |\psi(\vec{r}, t)|^2 dv & dv &= dx dy dz \\ |\psi(\vec{r}, t)|^2 &= \psi \psi^* & \text{où } \psi^* &\text{est le conjugué de } \psi\end{aligned}$$

La probabilité totale de présence de la particule dans tout l'espace est :

$$\int_0^{+\infty} dp = \iiint_{\text{espace}} |\psi|^2 dv = 1$$

* ψ est une fonction de carrée sommable car l'intégrale sur tout l'espace du carré de l'amplitude est finie.

* ψ est normée à l'unité

b- Densité de probabilité :

$$\frac{dp}{dv} = |\psi(\vec{r}, t)|^2$$

Elle est donnée par :

Conclusion : la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ décrit complètement l'état dynamique d'un système quantique.

III- Equation de Schrödinger

Problème :

Connaissant la fonction d'onde à un instant initial donné t_0 , comment déterminer cette fonction à un instant t ultérieur ?

Pour cela, Il faut considérer l'équation de propagation de l'onde ψ .

Cette équation de propagation, comme toute équation de la physique mathématique, doit être postulée et sa seule justification réside dans le succès lors de la confrontation de ses prédictions avec les résultats expérimentaux. Cependant, son choix est dicté par certaines conditions :

- L'onde doit obéir à la loi de superposition (caractéristique des ondes en général).
- Si ψ_1 et ψ_2 sont solutions de l'équation de propagation, alors toute combinaison linéaire de ψ_1 et ψ_2 (à savoir $a\psi_1 + b\psi_2$) est aussi solution de l'équation d'onde.

i- l'équation doit donc être linéaire et homogène.

ii- si l'équation est du 1^{er} ordre en $\frac{\partial}{\partial t}$, la connaissance de ψ à t_0 suffit pour connaître ψ à $t > t_0$.

iii- les prévisions de cette équation doivent se raccorder avec celles de la mécanique classique (principe de correspondance).

Ces 3 considérations ont conduit à la découverte de l'équation de Schrödinger (en 1927).

Ainsi, pour une particule de masse m , soumise à un potentiel $V(r, t)$, l'équation de Schrödinger est donnée par :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) \quad (i^2 = -1)$$

$$\Delta : \text{le laplacien} \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$V(\vec{r}, t)$ potentiel (énergie) due aux forces s'exerçant sur la particule de masse m (différent du potentiel électrique V).

IV- Etude quantique d'une particule libre

Une particule libre est une particule qui n'est soumise à aucune action extérieure. Son énergie potentielle est

nulle : $V(\vec{r}, t) = 0$ et son énergie totale est purement cinétique : $E = E_c = \frac{P^2}{2m}$

Dans ce cas, l'équation de Schrödinger devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

1- Solution du type onde plane

$$\psi(\vec{r}, t) = A e^{i(\vec{k}\vec{r} - \omega t)} = A e^{i(\vec{p}\vec{r} - Et)/\hbar}$$

Onde plane monochromatique

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad \text{et} \quad \vec{p} = \hbar\vec{k} = \frac{h}{\lambda} \vec{u} \quad \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{u}$$

a- Relation de dispersion :

La solution $\psi(\vec{r}, t)$ substituée dans l'équation de Schrödinger, donne :

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} = \omega(k) \quad \text{Relation de dispersion}$$

$$\text{On peut aussi donner :} \quad E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\text{Remarque : pour une particule libre,} \quad E = E_c = \frac{P^2}{2m} \Rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

b- Vitesse de phase :

La vitesse de phase V_ϕ est définie par : $V_\phi = \frac{\omega}{k}$. Elle représente la vitesse de propagation des plans d'ondes de phases égales (Plan d'onde : plan atteint par l'onde au même instant).

c- Principe de correspondance :

$$\text{En mécanique classique :} \quad E = E_c = \frac{1}{2} m V^2 = \frac{P^2}{2m}$$

$$(1) \quad E\psi = \frac{P^2}{2m} \psi$$

* à E on fait correspondre l'opérateur $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

* à P On fait correspondre l'opérateur $\frac{\square}{i} \nabla$

D'où, en mécanique quantique ; $i \square \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\square^2}{2m} \Delta \psi$ (2)

L'équation (1) représente le mouvement d'une particule libre en mécanique classique;

L'équation (2) représente le mouvement d'une particule libre en mécanique quantique.

d- Densité de probabilité:

Elle est donnée par :

$$|\psi(\vec{r}, t)|^2 = \psi^* \cdot \psi = A^2 = cte$$

la position de la particule est totalement indéterminée, car $|\Psi|^2$ est la même partout.

La probabilité totale de trouver la particule dans l'espace est:

$$P = \int_0^\infty dp = \iiint |\psi|^2 dv = A^2 \iiint_{\text{espace}} dv \rightarrow +\infty$$

Donc Ψ n'est pas une fonction de carré sommable.

Conclusion : l'onde plane monochromatique est une solution mathématique de l'équation de Schrödinger, pour une particule libre, mais elle ne représente pas de signification physique.

2- Solution du type paquet d'onde

a- définition :

La superposition d'ondes planes de vecteurs d'onde voisins conduit à ce qu'on appelle un paquet d'onde dont la fonction d'onde est donnée par :

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint g(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3 k$$

$g(\vec{k})$: poids statistique du paquet d'ondes ; $g(\vec{k}) \in \mathbb{C}$

$d^3 k = dk_x dk_y dk_z$ élément de volume dans l'espace des $\vec{k}$

$g(\vec{k})$ est la Transformée de Fourier (TF) de la fonction $\psi(\vec{r}, 0)$

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint g(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3 k$$

Remarque : à une dimension, on a

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int g(k_x) e^{ik_x x} dk_x = TF^{-1}(g(k))$$

b- probabilité

$$\begin{aligned}
 P &= \iiint \psi^* \psi d^3 r \\
 &= \iiint \left[\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint g^*(\vec{k}) e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3 k \right] \left[\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint g(\vec{k}') e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega t)} d^3 k' \right] d^3 r
 \end{aligned}$$

$$P = \iiint \iiint \left[\iiint \frac{1}{(2\pi)^3} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} d^3 r \right] g^*(\vec{k}) g(\vec{k}') d^3 k d^3 k'$$

Dans le cas unidimensionnel, on a :

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_r e^{i(k'-k)x} dx = \delta(k'-k)$$

Fonction de Dirac pure.

Par analogie, on a:

$$P = \iiint_k \left[\iiint_{k'} \delta(k'-k) g(k') \right] g^*(k) d^3k$$

$$P = \iiint_k g(k) g^*(k) d^3k = \iiint |g(k)|^2 d^3k$$

$$P = \iiint |\psi|^2 d^3r = \iiint |g(k)|^2 d^3k$$

Équation de Parseval dans le cas tridimensionnel.

c- Vitesse de groupe :

Un paquet d'onde présente un maximum central représentant l'interférence constructive des différentes ondes planes le constituant.

La vitesse de ce maximum est appelée : vitesse de groupe. Elle est définie comme étant : $V_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=k_0}$

En d'autres termes, V_g représente la vitesse du barycentre du paquet d'ondes.

Exemples

a- cas d'une onde lumineuse dans le vide :

$$p = \frac{E}{c} = \frac{\hbar \omega}{c} = \hbar k. \Rightarrow \omega = kc \Rightarrow E = \hbar ck$$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} v_\phi &= \frac{\omega}{k} = c \\ v_g &= \frac{d\omega}{dk} = c \end{aligned} \right\} v_\phi = v_g$$

b- Cas d'un électron libre non relativiste : ($v < c$)

$$\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \left. \begin{aligned} v_g &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} \\ v_\phi &= \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar \omega}{2m} \end{aligned} \right\} v_g = 2v_\phi$$

$v_g = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m} \Rightarrow$ la vitesse de groupe correspond à la vitesse $\frac{p}{m}$ de l'hypothèse de De Broglie

V- Principe d'incertitude d'Heisenberg

$$\psi(r,0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint g(k) e^{ikr} d^3k$$

Nous avons vu que :

À une dimension, on aura:

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (1)$$

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx \quad (2)$$

pour décrire une particule de vitesse approximativement fixe, v_0 , on choisit le poids statistique $g(k)$, nul

partout sauf pour des valeurs voisines de k_0 où $k_0 = \frac{mv_0}{\hbar}$.

D'où

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \frac{1}{2\Delta k} e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{e^{i(k_0+\Delta k)x} - e^{i(k_0-\Delta k)x}}{2ix\Delta k} \right]$$

$$\psi(x,0) = \frac{e^{ik_0 x}}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin x\Delta k}{x\Delta k}$$

$$2\Delta x \approx \frac{2\pi}{\Delta k} \Leftrightarrow \Delta x \Delta k \approx \pi$$

$$\Leftrightarrow \Delta x \Delta p \approx \pi \hbar \geq \hbar \Leftrightarrow \Delta x \Delta p \geq \hbar$$

On peut aussi écrire cette relation comme suit : $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ (Relation d'incertitude de Heisenberg)

VI- Valeur moyenne d'une grandeur physique

a- Valeur moyenne d'une grandeur physique

Soit une grandeur physique représentée par la fonction $f(r)$ et soit $\psi(r,t)$ la fonction d'onde d'une particule, on définit la valeur moyenne de la grandeur physique $f(r)$ par :

$$\langle f \rangle = \frac{\iiint \psi^*(r,t) f(r) \psi(r,t) d^3r}{\iiint \psi^*(r,t) \psi(r,t) d^3r}$$

Si ψ est normée à l'unité : $\langle f \rangle = \iiint \psi^*(r,t) f(r) \psi(r,t) d^3r$

Exemple:

Soit la fonction : $f = x$ position de la particule

$$\langle x \rangle = \iiint \psi^*(x,t) x \psi(x,t) dx$$

Soit une grandeur physique g , fonction de l'impulsion seulement $g(\vec{p})$; dans $\langle g(\vec{p}) \rangle$ on remplacera $\vec{p}$ par $i\hbar \nabla$.

Exemple : $g(\vec{p}) = \vec{p}$

$$\langle \vec{p} \rangle = \langle g(\vec{p}) \rangle = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \nabla \right) \psi dx$$

$$\langle \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \rangle = \int \psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx$$

Rappel : On définit l'écart-type ou écart quadratique par : $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

b/ Théorème d'Ehrenfest :

De l'équation de Schrödinger, on montre que :

$$(1) \quad \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle \quad \text{vitesse moyenne de la particule classique}$$

$$(2) \quad \text{et } \frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \quad V : \text{énergie potentielle de la particule.}$$

L'équation (2) est l'équivalent du Principe fondamental de la Dynamique en mécanique classique pour une particule soumise à une force conservative. Il établit la correspondance entre l'équation de Schrödinger et la mécanique classique pour une particule soumise à un potentiel.

VII- Solution stationnaires de l'équation de Schrödinger

1- Solutions stationnaires

Nous avons vu que l'équation de Schrödinger s'écrit:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

Lorsque le potentiel V est indépendant du temps, les solutions de cette équation sont dites stationnaires.

On peut aussi écrire l'équation de Schrödinger sous la forme :

$$H\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = E\psi(\vec{r}, t) \quad E : \text{énergie du système;}$$

$$\text{Où } H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \quad \text{Hamiltonien du système.}$$

H est indépendant du temps, le système est donc conservatif et son énergie est constante.

Séparation des variables :

Dans le cas d'un système conservatif (énergie constante) la fonction Ψ doit correspondre à une fréquence ν

bien déterminée donnée par la relation d'Einstein : $E = h\nu = \hbar \omega$; et la fonction peut s'écrire sous la forme :

$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \cdot A u(t)$ produit scalaire d'une fonction radiale et d'une fonction temporelle.

$$\psi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \cdot A u(t) \Rightarrow H\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r}) \cdot u(t) = \left(i\hbar \frac{\partial u(t)}{\partial t} \right) \Phi(\vec{r})$$

$$\Leftrightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) \right) \frac{1}{\Phi} = \left(i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} \right) \frac{1}{u}$$

terme en fonction de r

terme fonction du temps

On a égalité si et seulement si ces termes sont égaux à une constante près. Cette dernière n'est autre que l'énergie E du système.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) \right) \frac{1}{\Phi} = E = \left(i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} \right) \frac{1}{u}$$

* pour intégrer le premier terme, il faut connaître la forme de $V(r)$

* le second terme s'écrit:

$$-i\hbar \frac{\partial u}{\partial t} = E u \Rightarrow u(t) = B e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Où B est une constante.

Conclusion :

La fonction d'onde Ψ d'un système conservatif est donnée par : $\psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \cdot B e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

Pour simplifier, on prend : $B = 1 \Rightarrow \psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$

Ainsi dans un problème où V est indépendant du temps, on se limite à la recherche de $\Phi(r)$.

C'est-à-dire : $H\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})$ où $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r})$

2- Etudes de quelques systèmes unidimensionnels

Nous devons résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V(x) \psi = E \psi \quad (1)$$

Où la fonction d'onde Ψ ne dépend que de la variable x .

De l'équation (1), nous devons donc tirer :

- les énergies E admissibles;
- les fonctions d'ondes Ψ associées, qui doivent satisfaire aux conditions de continuité imposant

la continuité de Ψ et celle de $\frac{d\psi}{dx}$; sauf aux points où $V(x)$ est infini.

- de plus il faut s'assurer de la possibilité de normaliser Ψ , $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$

a- Potentiel en escalier :

i- comportement de la fonction d'onde :

L'équation de Schrödinger s'écrit aussi :

$$\psi''(x) + f(x) \psi(x) = 0 \quad ; \quad \text{où} \quad f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))$$

$\psi'' + f(x) \psi = 0$ est pour une valeur donnée de E , une équation différentielle linéaire du second ordre: si $\psi_1(x)$ et $\psi_2(x)$ sont solutions de cette équation, alors toute solution est de la forme :

$\psi(x) = A\psi_1(x) + B\psi_2(x)$ où A et $B \in \mathbb{C}$ (constantes complexes en général tout comme $\psi(x)$).

$$f(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))$$

*** si $E = V(x)$:**

Points de tournant classiques; ψ'' s'annule : ces points sont nécessairement des points d'inflexion de la fonction d'onde Ψ ; il en est de même des nœuds de la fonction $\psi(x)$, c'est à dire des points où elle s'annule.

*** si $E > V(x)$:**

$f(x) > 0$ d'où ψ et ψ'' sont de signes opposés. La fonction $\psi(x)$ a un comportement oscillatoire.

*** si $E < V(x)$:**

$f(x) < 0$ ψ'' et ψ ont même signe. La fonction $\psi(x)$ a un comportement "d'allure exponentielle" ceci ne veut pas dire que $\Psi(x)$ est une fonction exponentielle.

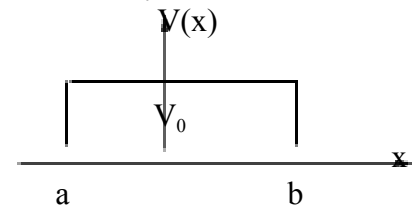
ii- Cas d'un potentiel constant :

Supposons que dans un intervalle $a \leq x \leq b$, $V(x)$ garde une valeur constante V_0 :

$$V(x) = V_0 \quad \text{si } x \in [a, b]$$

*** $E > V_0$:** on peut poser :
$$\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) = k^2$$

Où k est un réel



L'équation de Schrödinger devient : $\psi'' + k^2\psi = 0$, dont les solutions complexes indépendantes sont :

$$\psi_1(x) = e^{ikx} \quad \text{et} \quad \psi_2(x) = e^{-ikx}$$

Les solutions réelles indépendantes sont : $\psi_1(x) = \cos kx$ et $\psi_2(x) = \sin kx$, le comportement oscillatoire est, ici, évident.

*** $E < V_0$: on pose maintenant**

$$\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) = \gamma^2 \Rightarrow \psi'' - \gamma^2\psi = 0$$

Les solutions réelles indépendantes sont : $\psi_1(x) = e^{\gamma x}$ et $\psi_2(x) = e^{-\gamma x}$

Dans ce cas, le comportement exponentiel est confirmé

iii- Cas des potentiels pairs :

Un potentiel est dit pair, si la fonction $V(x)$ décrivant ce potentiel auquel est soumise la particule, est paire :

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

On écrit alors :

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

$$\text{changeons } x \text{ en } (-x) \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(-x) + V(x)\psi(-x) = E\psi(-x)$$

D'où $\phi(x) = \psi(-x)$ est aussi fonction d'onde, fonction propre de H

Posons :

$$\left. \begin{aligned} \varphi(x) &= \varphi(-x) \\ \varphi''(x) &= \varphi''(-x) \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x)$$

les solutions de l'équation de Schrödinger dans ce cas, sont les combinaisons linéaires :

$\psi_1(x) = \psi(x) + \phi(x)$; $\psi_2(x) = \psi(x) - \phi(x)$, qui sont respectivement paires et impaires.

Deux cas sont à envisager :

* l'une des deux fonctions, ψ_1 et ψ_2 , s'annule identiquement $\forall x$, Alors, il n'existe qu'une fonction d'onde propre d'énergie E , et elle est elle-même paire ou impaire.

* ψ_1 et ψ_2 sont identiquement non nulles et constituent deux fonctions d'onde propres de même énergie E ; on dit que le niveau d'énergie E est dégénéré.

iv- Conditions de normalisation:

L'équation de Schrödinger est homogène et linéaire par rapport à ψ . Pour une valeur fixée de l'énergie E , l'équation de Schrödinger ne donnera ψ qu'à une constante multiplicative près :

$$\psi = A\phi$$

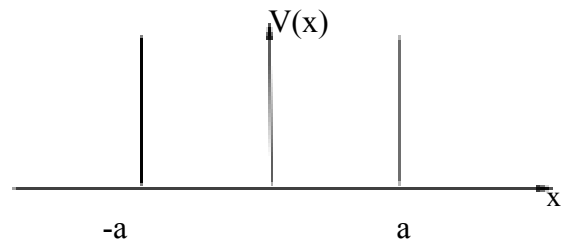
$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx = 1 \text{ d'où } |A| = \left[\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 dx \right]^{-1/2}$$

Ceci impose la valeur du module de A . Par contre, la fonction d'onde n'est déterminée qu'à un facteur de phase près.

b- Puits de potentiel infini :

Soit la fonction potentiel $V(x)$ définie par:

$$\begin{cases} V(x) = 0 & \text{si } -a \leq x \leq a \\ V(x) = \infty & \text{si } |x| > a \end{cases}$$



* à l'extérieur du puits, $V(x) = \infty$ et l'équation de Schrödinger n'est soluble que pour $\psi(x) = 0$. Reste à trouver la fonction d'onde dans l'intervalle $[-a, a]$ en lui imposant de s'annuler en $(-a)$ et $(+a)$ (continuité de $\psi(x)$).

* Dans $[-a, +a]$, $V(x) = V_0 = 0$, la forme générale des solutions est :

$$\psi = e^{ikx}, e^{-ikx}, \cos kx, \sin kx \quad \text{où} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Or $V(x)$ est pair, donc ψ sera soit paire soit impaire.

$$\Rightarrow \psi(x) = A \cos x \quad \text{ou} \quad \psi(x) = A \sin kx$$

les conditions aux limites, $\psi(a) = \psi(-a) = 0$ donnent:

* pour les fonctions paires :

$$\cos(ka) = \cos(-ka) = 0 \Leftrightarrow ka = \frac{2p+1}{2} \pi \quad (p \text{ entier } \geq 0)$$

$$D'où \text{ les énergies permises sont : } E = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\pi^2}{4a^2} (2p+1)^2$$

* pour les fonctions impaires :

$$\sin(ka) = \sin(-ka) = 0 \Leftrightarrow ka = p \cdot \pi \quad (n \text{ entier } > 0)$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} p^2$$

D'où les énergies permises sont :

- ces deux relations peuvent être regroupées en une seule :

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2 \quad \text{Où } n \text{ entier positif : nombre quantique ; L'énergie est donc quantifiée.}$$

Normalisation des fonctions d'onde :

* fonction paires :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \cos\left(\frac{2n+1}{2}\pi \frac{x}{a}\right) \\ \Rightarrow 1 &= A^2 \int_{-a}^{+a} \cos^2\left(\frac{2n+1}{2}\pi \frac{x}{a}\right) dx = A^2 \frac{a}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} 2 \cos^2(2n+1)\phi d\phi \\ A^2 \frac{a}{\pi} \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} [1 + \cos 2(2n+1)\phi] d\phi &= A^2 a \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{a}} \end{aligned}$$

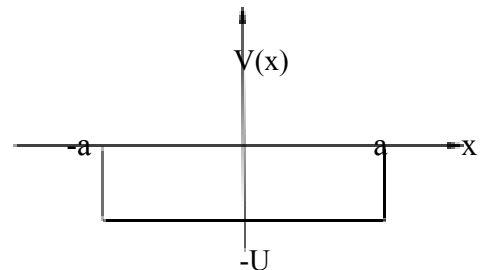
* fonctions impaires :

$$\begin{aligned} \psi(x) &= A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \\ \Rightarrow 1 &= A^2 \int_{-a}^{+a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = A^2 \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} 2 \sin^2 n\phi d\phi \\ A^2 \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} [1 - \cos 2n\phi] d\phi &= A^2 a \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{a}} \end{aligned}$$

c- Puits de potentiel carré fini :

Dans ce cas, on considère le potentiel défini par:

$$\begin{cases} V(x) = -U & \text{si } |x| < a \\ V(x) = 0 & \text{si } |x| \geq a \end{cases}$$



i- $U < E < 0$:

Dans ce cas, la fonction d'onde sera oscillatoire entre (-a) et (+a) et exponentielle pour $x > +a$ et $x < -a$ ($V \neq \infty \Rightarrow \psi$ n'a aucune raison de tendre vers 0)

$V(x)$ étant paire, la fonction d'onde sera soit paire soit impaire dans le puits, elle sera donc :

$$\psi(x) = A \cos kx \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + U) \quad k > 0$$

$$\text{Où} \quad \psi(x) = A \sin kx \quad \text{avec} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E + u) \quad k > 0$$

À l'extérieur du puits, elle est de la forme :

$$\begin{aligned} \text{*en } (x = +a) \quad & B e^{\gamma x} + C e^{-\gamma x} \quad \text{où} \quad \gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (-E) \\ \text{* en } (x = -a) \quad & B e^{-\gamma x} + C e^{+\gamma x} \end{aligned}$$

Et on doit avoir continuité de ψ et ψ' en (+a) et (-a).

Premier cas : $\psi(x) = A \cos kx$ (fonctions paires)

La continuité en a conduit aux deux relations suivantes:

$$\begin{cases} Be^{\gamma a} + Ce^{-\gamma a} = A \cos ka \\ \gamma(Be^{\gamma a} - Ce^{-\gamma a}) = -kA \sin ka \end{cases} \quad (1)$$

La fonction $(Be^{\gamma x} + Ce^{-\gamma x})$ ne peut être retenue que si elle tend vers 0 quand x tend vers l'infini. En fait, B doit être nul.

$$2Be^{\gamma a} = A(\cos ka - \frac{k}{\gamma} \sin ka)$$

$$B = 0 \quad \text{d'où la condition :} \quad \cos ka = \frac{k}{\gamma} \sin ka$$

k, γ étant deux fonctions de E , il s'agit donc d'une équation en E , dont la résolution permet de déterminer les états liés admissibles (résolution graphique).

Posons :

$$ka = X; \frac{2ma^2}{\hbar^2} u = X_0^2 (x_0 > 0)$$

$$\Rightarrow \operatorname{tg} X = \left[\left(\frac{X_0}{X} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}} = y \Rightarrow y = \left[\left(\frac{X_0}{X} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}}$$

les points d'intersection remontent vers les branches asymptotiques de : $y = \operatorname{tg} x$, et on a pratiquement :

$$*x_1 = \frac{\pi}{2} \Rightarrow (E_1 + U) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2$$

$$*x_3 = \frac{3\pi}{2} \Rightarrow (E_3 + U) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left(\frac{3\pi}{2} \right)^2$$

Deuxième cas : fonctions impaires :

Le calcul des niveaux d'énergie est effectué de la même manière que pour les fonctions paires.

pour $x > a$, $\psi = + Ce^{-\gamma x}$ (exponentielle décroissante)

pour $x < -a$, $\psi = - Ce^{\gamma x}$

$$\psi \text{ et } \frac{d\psi}{dx} \Rightarrow \begin{cases} A \sin ka = Ce^{-\gamma a} \\ kA \cos ka = -\gamma Ce^{-\gamma a} \end{cases}$$

En ($x = +a$); continuité de

$$\frac{k}{\gamma}$$

D'où $\sin ka = -\frac{\gamma}{k} \cos ka$ ce qui définit les énergies permises.

Une solution graphique reste possible:

$$-\cot gX = \left[\left(\frac{X_0}{X} \right)^2 - 1 \right]^{\frac{1}{2}}$$

$$X_2 = \pi \Leftrightarrow \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} = (E + U)$$

$$X_4 = 2\pi \Leftrightarrow (E + U) = 4 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \dots\dots$$

ii- $E > 0$:

Il est commode dans ce cas, de considérer le puits de potentiel entre $x = 0$ et $x = 2a$.

Nous cherchons désormais à décrire le comportement d'un flux de particules venant par exemple de la gauche avec l'énergie E . A ces particules qui, dans le potentiel nul, sont des particules libres, nous associerons une fonction d'onde.

$$\psi(x) = e^{ikx} \quad \text{avec } k > 0 \quad \text{tel que} \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

L'onde incidente parvenue à la discontinuité du potentiel en $x = 0$ va s'y diviser en une onde réfléchie retournant dans (I) et une onde transmise dans (II), c'est-à-dire, dans le puits de potentiel.

L'onde transmise dans (II) est en :

$$\psi(x) = e^{ik_0x} \quad \text{avec } k_0 > 0 \quad \text{tel que} \quad k_0^2 = \frac{2m(E+U)}{\hbar^2}$$

Cette onde transmise subira elle même une réflexion partielle en $x = 2a$ sur la deuxième discontinuité du potentiel, donnant naissance à une onde; réfléchie en e^{-ik_0x} , dans le puits, et une onde transmise dans (III) en : e^{ikx} ($V = 0$).

Il vient ainsi :

- dans la zone (I) : ($V = 0$) ; $\psi(x) = e^{ikx} + r.e^{-ikx}$ superposition de l'onde incidente et une onde réfléchie.

- dans la zone (II) : ($V = -U$)

$\psi(x) = \alpha e^{ik_0x} + \beta e^{-ik_0x}$; superposition de deux ondes dont l'une va vers les $x > 0$, l'autre en sens contraire.

- dans la zone (III) : ($V = 0$) ; $\psi(x) = t.e^{ikx}$

continuité de $\psi(x)$ et $\psi'(x)$:

a- en $x = 0$:

$$\begin{cases} 1 + r = \alpha + \beta \\ k(1 - r) = k_0(\alpha - \beta) \end{cases}$$

b- en $x = 2a$:

$$\begin{cases} t.e^{2ika} = \alpha.e^{2ik_0a} + \beta.e^{-2ik_0a} \\ kt.e^{2ika} = k_0(\alpha.e^{2ik_0a} - \beta.e^{-2ik_0a}) \end{cases}$$

Nous nous intéresserons à la détermination de r et t essentiellement, car ils donnent les ondes réfléchies et transmises par les puits.

En posant : $u = \frac{k}{k_0}$ ($u < 1$) ; $t' = te^{2ika}$; $\alpha' = \alpha e^{2ik_0a}$; $\beta' = \beta e^{-2ik_0a}$

Il vient alors :

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{1}{2}[(1+r) + u(1-r)] & \alpha' &= \frac{1}{2}(1+u)t' = \frac{1}{2}[(1+r) + u(1-r)]e^{2ik_0a} \\ \beta &= \frac{1}{2}[(1+r) - u(1-r)] & \beta' &= \frac{1}{2}(1-u)t' = \frac{1}{2}[(1+r) - u(1-r)]e^{-2ik_0a} \end{aligned}$$

et

On obtient finalement :

$$\begin{cases} r = -\frac{(1-u^2)\sin 2k_0a}{(1+u^2)\sin 2k_0a + 2iu\cos 2k_0a} \\ t = \frac{2iue^{-2ika}}{(1+u^2)\sin 2k_0a + 2iu\cos 2k_0a} \end{cases}$$

$|r|^2$ et $|t|^2$ donnent les flux de particules des ondes réfléchies et transmises.

$$|t|^2 + |r|^2 = \frac{(1-u^2)^2 \sin^2 2k_0 a + 4u^2}{(1+u^2)^2 \sin^2 2k_0 a + 4u^2 \cos^2 2k_0 a} = 1 \quad \text{Flux incident pris égal à l'unité}$$

Sachant que :

$$u^2 = \frac{E}{E+U} \Leftrightarrow |t|^2 = \frac{4u^2}{(1+u)^2 \sin^2 2k_0 a + 4u \cos^2 2k_0 a}$$

$$\Leftrightarrow |t|^2 = \frac{4 \frac{E}{E+U}}{\left(1 + \frac{E}{E+U}\right)^2 \sin^2 2k_0 a + \frac{4E}{E+U} \cos^2 2k_0 a} ; \quad |t|^2 = \frac{1}{1 + \frac{U^2}{4E(E+U)} \sin^2 2k_0 a}$$

$T = |t|^2$ est maximum lorsque : $\sin^2 2k_0 a = 0$

C'est à dire : $\sin 2k_0 a = 0 \Leftrightarrow k_0 a = n \cdot \frac{\pi}{2} \quad (n \text{ entier naturel})$

$$\Leftrightarrow k_0^2 = n^2 \frac{\pi^2}{4a^2} = \frac{2m(E+U)}{\hbar^2} \Rightarrow E+U = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2$$

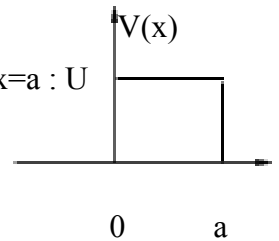
$$d'où : E = -U + \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2$$

d- Barrière de potentiel :

Elle est représentée par un potentiel qui est discontinu aux deux points d'abscisse $x=0$ et $x=a$: U

$$\begin{array}{lll} V(x) = 0 & \text{pour} & x < 0 \text{ et } x > a. \quad \text{zone (I) et zone (III)} \\ V(x) = U (> 0) & \text{pour} & 0 < x < a. \quad \text{zone (II)} \end{array}$$

x



*** Si $E > U$:**

Pour une énergie supérieure au potentiel (à la hauteur de la barrière) la mécanique classique prévoit une transmission de la particule avec un ralentissement dans la région centrale.

*** $0 < E < U$:**

Classiquement, la barrière de potentiel est infranchissable pour la particule qui est toujours réfléchiée dans la zone I.

Dans le cadre d'un traitement quantique, nous associerons au flux incident une onde plane dont le module sera pris égal à 1.

$$\begin{array}{ll} \text{* zone (I) :} & \psi(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \\ \text{* zone (II) :} & \psi(x) = Be^{\gamma x} + Ce^{-\gamma x} \quad \gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U - E) \\ \text{* zone (III) :} & \psi(x) = D e^{ikx} \end{array}$$

Les relations de continuité de ψ et ψ' s'écrivent :

$$x=0 \quad \begin{cases} 1+A=B+C \\ ik(1-A)=\gamma(B-C) \end{cases} ; \quad x=a \quad \begin{cases} Be^{\gamma a} + Ce^{-\gamma a} = Be^{ika} \\ \gamma(Be^{\gamma a} - Ce^{-\gamma a}) = ikDe^{ika} \end{cases}$$

posons : $u = \frac{ik}{\gamma}$; $B' = Be^{\gamma a}$; $C' = Ce^{-\gamma a}$; $D' = De^{ika}$

$$\Rightarrow B = \frac{1}{2}[(1+A)+u(1-A)] \quad C = \frac{1}{2}[(1+A)-u(1-A)]$$

$$B' = \frac{1}{2}(1+u)D' \quad ; \quad C' = \frac{1}{2}(1-u)D'; \quad \frac{C'}{B'} = \frac{1-u}{1+u} = e^{-2\gamma a} \frac{(1+u)A+(1-u)}{(1-u)A+(1+u)} = e^{-2i\varphi}$$

(u étant imaginaire pur et $\left| \frac{1-u}{1+u} \right| = 1$; on pose $\varphi = \text{Arctg} \frac{k}{\gamma}$)

$$A = \frac{e^{\gamma a} - e^{-\gamma a}}{e^{2i\varphi - \gamma a} - e^{-2i\varphi + \gamma a}}$$

$$D' = \frac{2B'}{1+u} = \frac{e^{\gamma a}}{1+u} [(1+u) + A(1-u)] = e^{\gamma a} (1 + Ae^{-2i\varphi})$$

$$D = \frac{2i \sin 2\varphi \cdot e^{-ika}}{e^{2i\varphi - \gamma a} - e^{-2i\varphi + \gamma a}}$$

Il apparaît ainsi une onde transmise à travers la barrière, qui assure aux particules une certaine probabilité de passage à travers la barrière, on dit qu'il y a alors « effet tunnel »

$R = |A|^2$: coefficient de réflexion et $T = |D|^2$: coefficient de transmission.

$$\Delta = e^{2i\phi \cdot \gamma a} - e^{-2i\phi \cdot \gamma a} \quad \text{s'écrit :}$$

$$\Delta = (\cos 2\phi + i \sin 2\phi) e^{\gamma a} - (\cos 2\phi - i \sin 2\phi) e^{\gamma a}$$

$$= 2i (\sin 2\phi \operatorname{ch} \gamma a + i \cos 2\phi \operatorname{sh} \gamma a)$$

Où ch et sh sont les cosinus et sinus hyperboliques définis par : $\operatorname{ch} x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$ et

$$\operatorname{sh} x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

Il vient alors :

$$|A|^2 + |D|^2 = \frac{(2\operatorname{sh} \gamma a)^2 + (2 \sin 2\varphi)^2}{\Delta^2}$$

$$|A|^2 + |D|^2 = \frac{\operatorname{sh}^2 \gamma a + \sin^2 2\varphi}{\sin^2 2\varphi (1 + \operatorname{sh}^2 \gamma a) + (1 - \sin^2 2\varphi) \operatorname{sh}^2 \gamma a} = 1$$

$$T = \frac{\sin^2 2\varphi}{\sin^2 2\varphi + \operatorname{sh}^2 \gamma a} = \left[1 + \operatorname{sh}^2 \gamma a \left(\frac{2 \operatorname{tg} \varphi}{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi} \right)^2 \right]^{-1}$$

Avec $\operatorname{tg} \varphi = \frac{k}{\gamma} \Rightarrow T = \left[1 + \frac{U^2}{4E(U-E)} \operatorname{sh}^2 \gamma a \right]^{-1}$; γ est proportionnel à : $(U - E)^{1/2}$.

Si	$E = 0$	l'effet tunnel disparaît ($T = 0$)
Si	E tend vers U	T tend vers 1.

Donc, contrairement aux prévisions classiques, la particule a une probabilité non nulle de franchir la barrière de potentiel : c'est l'effet tunnel. Cet effet est une réalité physique et intervient dans l'interprétation de beaucoup de phénomènes : Radioactivité alpha, passage des électrons d'un atome à un autre

Formalisme Fondamental de la Mécanique Quantique

L'espace des fonctions d'onde d'une particule est un espace de fonctions de carrés sommables ($\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx \neq +\infty$) appartenant à l'espace vectoriel ($\mathcal{L}^2$), Hilbert. De plus, ces fonctions d'onde doivent être suffisamment régulières (continues, indéfiniment dérivables).

L'ensemble F des fonctions d'onde, répondant aux conditions citées ci-dessus, constitue un sous espace de Hilbert $\mathcal{L}^2$ et satisfait à toutes les propriétés d'un espace vectoriel. Il est nécessaire d'étudier les propriétés mathématiques de l'espace des fonctions d'onde et des opérateurs agissant sur ces fonctions à l'intérieur de cet espace.

I. Produit scalaire

On définit le produit scalaire de deux éléments, ϕ et ψ de F par :

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

Dans la notation de Dirac, on fait correspondre à la fonction d'onde ψ , le vecteur d'état $|\psi\rangle$ appelé Ket, et à la fonction ϕ le vecteur conjugué $\langle\phi|$ appelé Bra, le produit scalaire devient alors :

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

D'où la norme d'une fonction d'onde :

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int |\psi|^2 d^3\vec{r}$$

* Propriétés:

$$*\langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^*$$

$$*\langle\phi|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\phi|\psi_1\rangle + \lambda_2\langle\phi|\psi_2\rangle$$

$$*\langle\lambda_1\langle\phi| + \lambda_2\langle\phi_2|\psi\rangle = \lambda_1^*\langle\phi_1|\psi\rangle + \lambda_2^*\langle\phi_2|\psi\rangle$$

$$*si\langle\phi|\psi\rangle = 0 \text{ alors } \phi \text{ et } \psi \text{ sont orthogonales}$$

$$*\langle\psi|\psi\rangle = \int |\psi|^2 d^3\vec{r} \geq 0$$

II. Opérateurs linéaires

1- Définition

Un opérateur A est dit linéaire si à tout vecteur d'état $|\psi\rangle$, il fait correspondre un Ket $|\psi'\rangle$ tel que : $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

De plus : $A|\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$ (linéarité de A)

On définit de même les opérateurs linéaires agissant sur les fonctions $\psi(x, y, z)$ tels que :

- opérateur parité : $\pi\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z)$

- opérateur position: $X\psi(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$

- opérateur impulsion: $P_x\psi(x, y, z) = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x, y, z) ; P_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$

2- Produits d'opérateurs

Le produit de deux opérateurs est défini par :

$$(AB) |\psi\rangle = A(B|\psi\rangle)$$

Généralement : $AB \neq BA$, ce qui nous permet de définir le commutateur de A et B comme étant :

$$[A, B] = AB - BA$$

Exemples:

$$[X_i, X_j] = 0 \quad ; \quad [X, P_x] = i\hbar \quad ; \quad [X_i, P_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad ; \quad [P_i, P_j] = 0$$

3- Propriétés des commutateurs

* A et B commutent si et seulement si $[A, B] = 0$

$$* [A, B] = - [B, A]$$

$$* [A, B+C] = [A, B] + [A, C]$$

$$* [A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$$

$$* [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (\text{Identité de Jacobi})$$

$$* [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0$$

4- Fonctions d'opérateurs

*Une fonction F d'un opérateur linéaire A est un opérateur linéaire donné sous la forme d'une série entière :

$$F(A) = \sum_0^{+\infty} a_k A^k$$

$$\text{Exemple : } e^A = \sum_0^{+\infty} \frac{A^k}{k!}$$

*Théorème : Si B commute avec [A, B], alors : $[A, F(B)] = [A, B] \frac{\partial F(B)}{\partial B}$

III- Bases orthonormées et complètes

1) Bases orthonormées discrètes dans $\{|u_i(r)\rangle\}$

*L'ensemble $\{|u_i(r)\rangle\}$ est orthonormé si :

$$\langle u_i | u_j \rangle = \int u_i^* u_j d^3r = \delta_{ij}$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker : , ce sont les éléments de la matrice unité.

*Cet ensemble constitue une base complète si tout ket $|\psi\rangle$ appartenant à $\mathcal{L}^2$ peut se développer d'une façon et d'une seule sur les $\{|u_i\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |u_i\rangle$$

$$C_i = \langle u_i | \psi \rangle = \int u_i^*(r) \psi(r) d^3r, C_i^* = \langle \psi | u_i \rangle$$

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_i |C_i|^2$$

$\Rightarrow$

2) Bases continues

Une base continue sur F est un ensemble de fonctions V_α , $\alpha \in R$ qui forment un système libre. Notons que puisque l'indice α est continu, les fonctions V_α ne sont pas des fonctions d'ondes : $V_\alpha \notin F$.

*Relation d'orthonormalisation : $\langle V_\beta \rangle = \delta(\alpha - \beta)$

Relation de Fermeture : $\int_{-\infty}^{+\infty} V_\alpha^(x) V_\alpha(y) d\alpha = \delta(x - y)$

*Développement d'une fonction d'onde suivant $V_\alpha(x)$: $\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} C(\alpha) V_\alpha(x) d\alpha$

*Composantes d'une fonction d'onde suivant V_α : $C(\alpha) = \langle \psi \rangle$

Produit scalaire : $\langle \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} C^(\alpha) D(\alpha) d\alpha$

*Norme : $\langle \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |C(\alpha)|^2 d\alpha$

Exemples : Base des Ondes Planes Monochromatiques :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) e^{+i\frac{p}{\hbar}x} dp ; \quad \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\psi}(p) V_p(x) dp$$

Cela veut dire que les fonctions $V_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{+i\frac{p}{\hbar}x}$ forment une base continue sur F et que la composante de $\psi(x)$ suivant la base des Ondes Planes Monochromatiques est : $\bar{\psi} = \langle \psi \rangle$

*Relation d'orthonormalisation : $\langle V_q \rangle = \delta(p - q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\pm i\frac{(p-q)}{\hbar}x} dx$

Relation de Fermeture : $\int_{-\infty}^{+\infty} V_p^(x) V_p(y) dp = \delta(x - y) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\pm i\frac{(x-y)}{\hbar}p} dp$

3) Relation de fermeture

Elle permet d'exprimer que l'ensemble $\{|u_i\rangle\}$ constitue une base:

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \left(\sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \right) |\psi\rangle \Rightarrow \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = 1$$

C'est une relation de projection non sur un seul axe, mais sur tous les axes (toutes les directions de l'espace)

4) Opérateur de projection

Le projecteur P_ψ sur un Ket $|\psi\rangle$ est défini par :

$$P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|$$

$$P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle \langle \psi| \psi\rangle \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| = P_\psi$$

$$\Rightarrow P_\psi^2 = P_\psi$$

5) Opérateur adjoint

Les opérateurs A et A^+ sont dits adjoints l'un de l'autre si les matrices qui les représentent dans une représentation donnée sont adjointes l'une de l'autre :

$$\langle u_i | A^+ | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^*$$

$$A_{ij}^+ = A_{ij}^*$$

Propriétés :

$$a) (A^+)^+ = A \quad ; \quad b) (\lambda A)^+ = \lambda^* A^+ \quad ; \quad c) (AB)^+ = B^+ A^+ \quad ; \quad d) (A + B)^+ = A^+ + B^+$$

$$e) A^+ = A \Leftrightarrow \langle \cdot | = \langle \cdot | A^+ \quad ; \quad f) \forall (\varphi, \psi) \in E^2, \langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$$

$$g) [A, B]^+ = (AB - BA)^+ = B^+ A^+ - A^+ B^+ = [B^+, A^+]$$

Un opérateur est dit hermitique si et seulement si : $A = A^+$, ou $A_{ij}^* = A_{ij}^+$ c'est-à-dire que les éléments matriciels sont réels.

IV. Diagonalisation d'un opérateur :

1) Equations aux valeurs propres

On dit que $|\psi\rangle$ est vecteur propre de A avec la valeur propre a_n si :

$$A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$$

Si a_n est associé à un seul ket propre, alors elle est dite non dégénérée (ou simple). Sinon, elle est dégénérée.

Pour le cas d'une particule dans un problème à une dimension, l'équation aux valeurs propres est :

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$$

E est l'énergie propre de H associée au vecteur $|\phi\rangle$

Propriétés :

* Si $|\Psi\rangle$ est un vecteur propre de A , alors $\alpha|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre.

$$A(\alpha|\Psi\rangle) = \alpha A|\Psi\rangle = \alpha a_n|\Psi\rangle = a_n(\alpha|\Psi\rangle)$$

$$A(\alpha|\Psi\rangle) = a_n(\alpha|\Psi\rangle)$$

en posant comme condition de normalisation : $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$

$$\alpha = e^{i\phi}$$

alors : $|\Psi\rangle$; $e^{i\phi} |\Psi\rangle$ sont vecteurs propres

* Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.

$$A = A^+ \quad (A \text{ hermitique})$$

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \Rightarrow \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle \quad (1) \quad \langle\Psi|$$

$$A^+ = \lambda^*\langle\Psi| \Rightarrow \lambda = \lambda^*$$

$$\langle\Psi|A = \lambda^*\langle\Psi| \Rightarrow \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda^*\langle\Psi|\Psi\rangle$$

2) Equation caractéristique

C'est l'équation dont la résolution permet de calculer les différentes valeurs propres a_k d'un opérateur linéaire A : $\text{Det}(A - a) = 0$

L'application successive de l'équation aux valeurs propres permet alors d'obtenir les vecteurs propres associés aux valeurs propres de A .

V- Observables

On appelle observable, un opérateur A tel que:

- $A = A^+$ (A est hermitique)
- l'ensemble des vecteurs propres forme une base orthonormée.

C'est-à-dire :

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| = I ; \quad g_n : \text{dégénérescence de la valeur propre } a_n.$$

L'opérateur A peut s'écrire:

$$A = A \cdot I = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} A |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i|$$

$$A = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i|$$

$$A = \sum_n a_n P_n$$

$$\text{avec } P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| \quad \text{projecteur sur le sous-espace engendré par } a_n$$

Théorème 1:

Les valeurs propres d'un opérateur hermitique sont réelles.

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle\Psi|A|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \langle\Psi|A^+|\Psi\rangle^* = \langle\Psi|A|\Psi\rangle^* \quad \Rightarrow \quad \langle\Psi|A|\Psi\rangle \in \mathbb{R}$$

$$\langle\Psi|\Psi\rangle \in \mathbb{R}^+$$

$$\Rightarrow \lambda \text{ est réelle.}$$

Théorème 2 :

Si deux opérateurs A et B commutent et si $|\Psi\rangle$ est un vecteur propre de A; B $|\Psi\rangle$ est aussi vecteur propre de A associé à la même valeur propre.

Démonstration :

on a A et B commutent $\Leftrightarrow [A, B] = AB - BA = 0 \Leftrightarrow AB = BA$
et $A |\Psi\rangle = a |\Psi\rangle$

$$BA |\Psi\rangle = Ba |\Psi\rangle = a(B |\Psi\rangle) = A(B |\Psi\rangle)$$

i) si a est non dégénérée : B $|\Psi\rangle = a |\Psi\rangle \Rightarrow |\Psi\rangle$ lui même est un vecteur propre de B.

ii) si a est dégénérée $\Rightarrow B |\Psi\rangle \in E_a$

Théorème 3 :

Si deux observables A et B commutent et si $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_2\rangle$ sont deux vecteurs propres de A avec des valeurs propres différentes alors l'élément de matrice $\langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle$ est nul.

Démonstration :

$$\left. \begin{aligned} A |\Psi_1\rangle &= a_1 |\Psi_1\rangle \\ A |\Psi_2\rangle &= a_2 |\Psi_2\rangle \end{aligned} \right\} \text{ avec } a_1 \neq a_2$$

On a : $[A, B] = 0 \Leftrightarrow AB = BA$

$$0 = \langle \Psi_1 | [A, B] | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_1 | AB - BA | \Psi_2 \rangle = (a_1 - a_2) \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle$$

$$\text{or : } a_1 \neq a_2 \Rightarrow \langle \Psi_1 | B | \Psi_2 \rangle = 0$$

Théorème 4 :

Si deux observables A et B commutent, on peut construire une base orthonormée de l'espace des états constituée par des vecteurs propres communs à A et B (la réciproque est aussi vraie).

Démonstration :

$$\Rightarrow A |u_{n,m}^i\rangle = a |u_{n,m}^i\rangle$$

$$[A, B] = 0 \quad B |u_{n,m}^i\rangle = b_m |u_{n,m}^i\rangle$$

IV. ECOC (Ensemble complet d'observables qui commutent)

Définition :

On appelle ECOC, tout ensemble d'observables A, B, C, telles que :

- 1- toutes les observables A, B, C, commutent deux à deux;
- 2- la donnée des valeurs propres de tous les opérateurs A, B, C, suffit à déterminer un vecteur propre commun unique.

A, B, C, est un ECOC s'il existe une base formée de vecteurs propres communs et si cette base est unique.

Exemple : L'observable position X est un ECOC,
En effet, pour toute valeur propre x , il existe un seul ket propre $|x\rangle$ tel que : $X|x\rangle = x|x\rangle$.

Postulats de la Mécanique Quantique

Les hypothèses de Planck, d'Einstein, de Bohr et de De Broglie ainsi que le principe d'incertitude de Heisenberg ont été à la base de la dualité onde – corpuscule. Ce sont des postulats de la mécanique quantique. Dans ce chapitre, on se propose d'énumérer les postulats qui permettent une description mathématique à la théorie quantique.

1) Les Postulats

Postulat 1 : À un instant t , l'état d'un système physique est défini par la donnée d'un vecteur ket $|\Psi(t)\rangle$ appartenant à l'espace des états E , ou d'une façon équivalente par une fonction d'onde $\Psi(t, x) = \langle \psi(t) | \in F$.

Postulat 2 : Toute grandeur physique mesurable A est décrite par un opérateur hermétique A agissant dans l'espace des états E . L'opérateur A est une observable.

Postulat 3 : La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres a_n de l'observable A correspondante. L'ensemble $\{a_n\}$ est appelé le spectre de l'observable A .

Postulat 4 : Lorsqu'on mesure une grandeur physique A associée à un système dans l'état normé $|\Psi(t)\rangle$, la probabilité $P(a_n)$ d'obtenir comme résultat la valeur propre a_n de l'observable A correspondante est :

$$P(a_n) = |\langle u_n | \Psi(t) \rangle|^2$$

* Dans le cas où a_n est g_n fois dégénérée, $P(a_n)$ est donnée par : $P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \Psi(t) | u_n^i \rangle|^2$

Où $\{|u_n^i\rangle\}_{i=1, \dots, g_n}$ est la base orthonormée dans le sous espace propre E_n associé à la valeur propre a_n de A .

Remarques : * si $|\Psi(t)\rangle$ n'est pas normé, $P(a_n) = \frac{1}{\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle} \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \Psi(t) | u_n^i \rangle|^2$

** dans le cas d'un spectre continu, le 4^{ème} Postulat s'énonce comme suit :

Lorsqu'on mesure une grandeur physique A associée à un système dans l'état $|\Psi(t)\rangle$ normé, la probabilité d'obtenir un résultat compris entre α et $\alpha + d\alpha$ est égale à : $dP(\alpha) = \langle \Psi(t) | v_\alpha^2 | \Psi(t) \rangle d\alpha$ où v_α est le vecteur propre correspondant à la valeur propre α de A .

Postulat 5 : Si la mesure de la grandeur physique A sur le système dans l'état $|\Psi\rangle$ donne le résultat a_n , l'état du système après la mesure est la projection normée $|\Psi'\rangle$ sur le sous espace propre associé à a_n ; soit :

$$|\Psi'\rangle = \frac{P_n |\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | P_n | \Psi \rangle}} \quad ; \quad \text{avec } P_n = \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i|, \text{ opérateur projection sur le sous-espace propre associé à } a_n.$$

Postulat 6 : L'évolution dans le temps du vecteur d'état $|\Psi(t)\rangle$ est régie par l'équation de Schrödinger qui s'écrit dans l'espace des états :

$$i\hbar \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad \text{où } H(t) \text{ est l'observable associée à l'énergie totale du système.}$$

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

C'est cette équation même qui s'écrit dans l'espace des fonctions d'ondes (représentation position) :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(t, x)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(t, x)$$

2) Valeur moyenne d'une observable dans un état donné

Définition : La valeur moyenne de l'observable A dans un état normé $|\Psi(t)\rangle$, noté $\langle A \rangle$, est définie comme la moyenne statistique des résultats obtenus en effectuant un grand nombre N de mesures de cette observable sur des systèmes dans le même état $|\Psi(t)\rangle$.

Elle est donnée par :

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n P(a_n)$$

a_n sont les valeurs propres de A et $P(a_n)$ représente la probabilité de trouver la valeur a_n lors d'une mesure de A.

La valeur moyenne $\langle A \rangle$ peut également s'écrire : $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$

3) Ecart quadratique moyen

Par définition, l'écart quadratique moyen est égal à la racine carrée de la moyenne des carrés des écarts, il est donné par :

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

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Lorsqu'on veut mesurer $\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle$

$$\langle A - \langle A \rangle \rangle = \langle \Psi | A - \langle A \rangle | \Psi \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle - \langle A \rangle = 0 \quad \text{mauvaise mesure.}$$

On est donc amené à mesurer : $(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \rangle$

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

4) Relation d'Incertainité de Heisenberg

Considérons deux observables A et B conjugués ($[A, B] = i\hbar$).

ΔA et ΔB satisfont la relation suivante : $\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{\hbar}{2}$ quelque soit le système étudié.

Cas particulier : $\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

5) Equation de Schrödinger des systèmes conservatifs

Définition : Un système est conservatif si son Hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps.

Soit $\{ |\varphi_n\rangle \}$ une base de vecteurs propres attachés à l'observable H : $H|\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$

$|\varphi_n\rangle$ et E_n sont indépendants du temps. La connaissance de E_n et $|\varphi_n\rangle$ permettent de déterminer l'évolution au cours du temps d'un état quelconque $|\Psi(t)\rangle$.

La décomposition est donnée par : $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle$ avec $c_n(t) = \langle \varphi_n | \Psi(t) \rangle$

Puis en considérant l'équation de Schrödinger, on a :

$$i\hbar \frac{d\langle \varphi_n | \Psi(t) \rangle}{dt} = \langle \varphi_n | H | \Psi(t) \rangle \Leftrightarrow i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = E_n c_n(t)$$

D'où $c_n(t) = c_n(t_0) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} (t-t_0)}$ et par conséquent :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} (t-t_0)} |\varphi_n\rangle$$

Ainsi la donnée des conditions initiales $c_n(t_0)$ de $|\varphi_n\rangle$ et E_n permet de déterminer l'état du système.

6) Evolution de la valeur moyenne d'une observable

La valeur moyenne de l'observable $A(t)$ dans l'état normé $|\Psi(t)\rangle$ d'un système est définie par :

$$\langle A \rangle_\Psi = \langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle$$

Son évolution dans le temps est décrite par l'équation suivante :

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Démonstration :

$$\frac{d\langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle}{dt} = \left(\frac{d\langle \Psi(t) |}{dt} A(t) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | \frac{dA(t)}{dt} \right) + \langle \Psi(t) | A(t) \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} \rangle$$

$$\text{Comme : } \frac{d\langle \Psi(t) |}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H(t) \quad ; \quad \frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} H(t) |\Psi(t)\rangle$$

On obtient l'équation d'évolution de la valeur moyenne d'une observable A :

$$\frac{d\langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle}{dt} = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | H(t) A(t) | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | A(t) \frac{1}{i\hbar} H(t) | \Psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

$$\frac{d\langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi(t) | A(t) H(t) - H(t) A(t) | \Psi(t) \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Si $A(t)$ ne dépend pas explicitement du temps alors $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$, la relation précédente se réduit à :

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle$$

Si A commute avec H alors : $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = 0 \rightarrow A$ est une constante du mouvement.

7) Théorème d'Ehrenfest

Ce théorème montre le lien entre la mécanique quantique et la mécanique classique à travers les variables positions et impulsions.

L'évolution de $\vec{R}$ et $\vec{P}$ conduit à :

$$\frac{d\langle \vec{R} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{R}, H] \rangle + \langle \frac{\partial \vec{R}}{\partial t} \rangle ;$$

$$\frac{d\langle \vec{P} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\vec{P}, H] \rangle + \langle \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \rangle$$

$\langle \frac{\partial \vec{R}}{\partial t} \rangle$ et $\langle \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \rangle$ sont nuls car ces opérateurs ne dépendent du temps que de façon implicite.

D'autre part :

$$[\vec{R}, H] = \left[\vec{R}, \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{R}) \right] = \left[\vec{R}, \frac{\vec{p}^2}{2m} \right]$$

Et

$$[\vec{P}, H] = \left[\vec{P}, \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{R}) \right] = [\vec{P}, V(\vec{R})]$$

Comme $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$

Alors

$$\left[\vec{R}, \frac{\vec{p}^2}{2m} \right] = \frac{i\hbar}{m} \vec{P}$$

D'autre part, d'après la définition de l'opérateur $\vec{P}$, l'équation s'écrit : $[\vec{P}, V(\vec{R})] = -i\hbar \vec{\nabla} V(\vec{R})$

Finalement, nous obtenons les relations suivantes : (Expression du théorème d'Ehrenfest)

$$\frac{d\langle \vec{R} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \vec{P} \rangle$$

$$\frac{d\langle \vec{P} \rangle}{dt} = - \langle \vec{\nabla} V(\vec{R}) \rangle$$

Des formes similaires aux équations de la mécanique classique

OSCILLATEURS HARMONIQUES

A) Hamiltonien

L'oscillateur harmonique est le modèle le plus simple qu'on puisse utiliser pour décrire les états de vibration d'un système physique.

L'oscillateur harmonique classique a été étudié en mécanique du solide (du point). On a vu que l'énergie mécanique du système s'écrivait comme suit :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) = \frac{p^2}{2m} + m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

Où m est la masse du point matériel (ou particule), ω sa pulsation, x son déplacement par rapport à la position d'équilibre et p , sa quantité du mouvement.

En mécanique quantique, on associe aux grandeurs classiques x et p , les observables X et P vérifiant la relation de commutation : $[X, P] = i\hbar$ (2)

Ainsi, l'opérateur hamiltonien du système est donné par : $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$ (3)

On remarque que H est indépendant du temps : le système est stationnaire. Par conséquent, l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle ; \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \right) |\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (4)$$

qui s'écrit en représentation $|x\rangle$: $\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \phi(x) = E \phi(x)$ (5)

Introduisons les opérations définies par : $\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X$ et $\hat{P} = \frac{P}{\sqrt{m\omega\hbar}}$ (6)

Où les observables $\hat{X}$ et $\hat{P}$ sont sans dimension.

Si on remplace X et P dans la relation (2) en fonction de $\hat{X}$ et $\hat{P}$, on obtient la relation :

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i \quad (\text{sans dimension}) \quad (7)$$

Et l'hamiltonien (3) devient : $H = \hbar\omega \hat{H}$ avec : $\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$ (8)

Résoudre $H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$ revient à résoudre : $H|\phi_n\rangle = \epsilon_n|\phi_n\rangle$, ϵ_n sera proportionnelle à E ($\epsilon = \frac{E}{\hbar\omega}$).

B) Opérateurs d'Annihilation a^- , de Création a^+ et du Nombre de particules N

Comme l'opérateur $\hat{H}$ est une somme de deux carrés, on peut le factoriser en tenant compte de la non commutativité des observables $\hat{X}$ et $\hat{P}$.

On aura :

$$\frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i\hat{P}) \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i\hat{P}) + \frac{i}{2} \hat{P} \hat{X} - \frac{i}{2} \hat{X} \hat{P}$$

$$\frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}]$$

On définit deux opérateurs : $a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$ et $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$ (10)

Ces opérateurs portent le nom d'opérateur de création a^+ et opérateur d'annihilation a .

Les deux opérateurs a^+ et a sont adjoints l'un de l'autre et non hermitiques.

Ce qui revient à écrire :

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^+ + a) ; \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^+ - a)$$

L'opérateur $\hat{H}$ s'écrit alors : $\hat{H} = a^+ a + \frac{1}{2}$

Leur commutateur est : $[a, a^+] = \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] = \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}] + \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}]$
soit $[a, a^+] = 1$

Introduisons l'opérateur nombre de particules N défini par $N = a^+ a$

On aura $\hat{H} = N + \frac{1}{2}$ et $H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega$

Les vecteurs propres de H sont donc aussi vecteurs propres de N et réciproquement.

N est un opérateur hermitique car $N^+ = (a^+ a)^+ = (a^+)^+ (a)^+ = a a^+ = N$ et ses commutateurs avec a et a^+ sont :

$$[N, a] = -a \text{ et } [N, a^+] = a^+$$

C) Vecteurs propres et Valeurs propres

Soit $|\phi_n\rangle$ le vecteur propre de N avec la valeur propre n ; $N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$

D'où $H|\phi_n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$

Les $|\phi_n\rangle$ sont aussi vecteurs propres de H avec les valeurs propres $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

D) Interprétations des opérateurs $a^\pm$ et a

$$i) N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle ; \quad [N, a]|\phi_n\rangle = -a|\phi_n\rangle$$

En effet, $Na = aN - a$ donc : $Na|\phi_n\rangle = (aN - a)|\phi_n\rangle = aN|\phi_n\rangle - a|\phi_n\rangle = (n-1)a|\phi_n\rangle$

Si $|\phi_n\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre n , $a|\phi_n\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre $n-1$.

Et comme $H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega$ alors $H(a|\phi_n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|\phi_n\rangle)$

L'application de l'opérateur a au vecteur propre $|\phi_n\rangle$ fait baisser l'énergie d'une quantité $\hbar\omega$ qui est un quantum d'énergie. Pour cette raison, a est appelé *opérateur d'annihilation*.

$$ii) N |\phi_n\rangle = n |\phi_n\rangle ; \quad [N, a^+] |\phi_n\rangle = a^+ |\phi_n\rangle$$

$$\text{En effet, } Na^+ = a^+ N + a^+ \text{ donc } : Na^+ |\phi_n\rangle = (a^+ N + a^+) |\phi_n\rangle = a^+ N |\phi_n\rangle + a^+ |\phi_n\rangle = (n+1)a^+ |\phi_n\rangle$$

Si $|\phi_n\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre n , $a^+ |\phi_n\rangle$ est ket propre de N avec la valeur propre $n+1$.

$$\text{Et comme } H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega \text{ alors } H(a^+ |\phi_n\rangle) = (E_n + \hbar\omega) (a^+ |\phi_n\rangle)$$

L'application de l'opérateur a^+ au vecteur propre $|\phi_n\rangle$ fait augmenter l'énergie d'une quantité $\hbar\omega$ qui est un quantum d'énergie. Pour cette raison, a^+ est appelé *opérateur de création*.

E) LEMME :

Les valeurs propres n de N sont des entiers naturels $n \in \mathbb{N}$.

En effet, la norme au carré de $a |\phi_n\rangle$ (qui est Vecteur propre de N et de H) est donné par:

$$\begin{aligned} \langle \phi_n | a^+ a | \phi_n \rangle &= \langle \phi_n | N | \phi_n \rangle = n \langle \phi_n | \phi_n \rangle \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

D'où $n \geq 0$

Supposons que n est non entier. On montrera que ceci est en contradiction avec le lemme énoncé plus haut.

Soit q un entier supérieur ou égal à zéro ($q \geq 0$) tel que : $q < n < q+1$

D'où $n-q > 0$ et $n-q-1 < 0$

On a la relation : $N(a^{p+1} |\phi_n\rangle) = (n-p) (a^{p+1} |\phi_n\rangle)$ pour tout entier naturel p .

(Relation facile à vérifier pour les cas $p=0, 1, 2, \dots, q, \dots$)

$$\text{Calculons } N(a^{q+1} |\phi_n\rangle) = (n-q-1) (a^{q+1} |\phi_n\rangle)$$

Or $n-q-1 < 0$ à cause de l'hypothèse de départ.

Si n n'est pas un entier, construire un vecteur propre non nul de N avec une valeur propre négative est en contradiction avec le lemme ci-dessus.

Relativité Restreinte

Au début du XX^e siècle, les lois de l'électromagnétisme, développées par J. C. Maxwell, posaient des problèmes non résolus. En effet, elles semblaient violer le principe de relativité, qui affirme que les lois physiques s'expriment de manière identique dans tous les référentiels galiléens. Ce principe avait été initialement énoncé par GALILEE pour les mouvements. Il ne posait pas de problème pour les lois de la mécanique de NEWTON, qui gardent bien la même forme dans tous les référentiels en mouvement de translation rectiligne uniforme les uns par rapport aux autres.

1. L'invariance des lois de la mécanique

Le mouvement d'un corps est relatif à un référentiel auquel sont liés un repère temporel et un repère spatial, c'est la relativité galiléenne. Lorsqu'un référentiel (R') se déplace à vitesse constante $\vec{v} = v\vec{i}$ par rapport à un autre référentiel (R), les coordonnées (x', y', z', t') d'un point M dans le référentiel (R') sont liées à ses coordonnées (x, y, z, t) dans (R).

En supposant que les origines des repères coïncident à la date t'=t=0, on a :

$$x' = x - v t$$

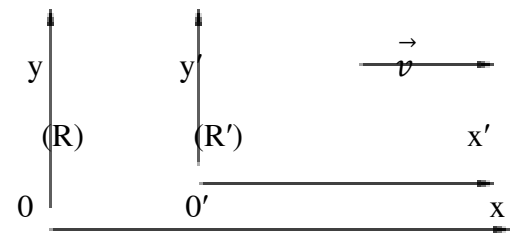
$$x = x' + v t'$$

$$y' = y \quad \text{et réciproquement}$$

$$y = y'$$

$$z' = z$$

$$z = z'$$



$$\text{et } t = t' \quad ; \quad \vec{r} = \vec{r}' + \vec{v} t$$

Ces relations correspondent à la transformation de Galilée. Elles peuvent être appliquées aux lois de Newton.

Si on appelle u (respectivement u'), la vitesse d'un mobile mesurée dans (R) (respectivement R'), la loi de composition des vitesses s'écrit : $u' = u - v$.

Par exemple, pour la deuxième loi, dans un référentiel d'inertie (R) (référentiel galiléen), quand un observateur mesure qu'un point matériel a une quantité de mouvement $\vec{p}$ dont la variation est $\frac{d\vec{p}}{dt}$, il peut relier force résultante $\vec{F}$ appliquée à ce point et la variation de la quantité de mouvement par : $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$.

Si un autre observateur, lié à (R'), mesure pour ce même point une quantité de mouvement $\vec{p}'$, il attribuera une force $\vec{F}' = \frac{d\vec{p}'}{dt}$.

$$\text{Or } \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d^2x'}{dt'^2} ; \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{d^2y'}{dt'^2} \quad \text{et} \quad \frac{d^2z}{dt^2} = \frac{d^2z'}{dt'^2} \quad ; \quad \vec{F} = m \frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = m \frac{d^2\vec{r}'}{dt'^2}$$

La masse m étant la même dans les deux référentiels, $\frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d\vec{p}'}{dt'}$; finalement, on obtient : $\vec{F}' = \vec{F}$

La force résultante est invariante, elle a la même valeur dans les deux référentiels.

La deuxième loi de Newton garde la même forme dans les deux référentiels, elle est invariante par changement de référentiel galiléen, bien que la vitesse des corps par rapport à chacun de ces référentiels soit différente.

2. Les Postulats de la Relativité

Pour concilier le principe de l'invariance des lois de la physique et les lois de l'électromagnétisme de J.C. Maxwell, A. EINSTEIN énonce en 1905 les deux postulats de la relativité restreinte.

- **Principe de relativité** : Les lois de la physique s'expriment de la même façon dans tous les référentiels inertiels (galiléens). Elles sont invariantes.
- **Principe de la constance de la vitesse de la lumière dans le vide** : La vitesse de la lumière c dans le vide a la même valeur dans tous les référentiels inertiels.

A partir de ces postulats, on trouve les nouvelles équations de changement de référentiel (formulées par Lorentz et Poincaré), et on construit un nouvel ensemble de lois mécaniques baptisé : **relativité restreinte** (special relativity).

3. Vocabulaire de base de la relativité restreinte

a) Notion d'événement

En relativité restreinte, la notion d'événement est particulièrement importante. Un événement se produit en un point unique de l'espace et à un instant unique dans le temps.

Un événement peut être observé par plusieurs observateurs. Pour localiser précisément un événement, un observateur doit être muni d'une règle (repère d'espace) et d'une horloge (repère de temps). On associe donc un référentiel à chaque observateur.

b) Temps propre et temps mesuré

On s'intéresse essentiellement à la durée séparant deux événements notés E_1 et E_2 . Dans un référentiel donné, les coordonnées de ces deux événements seront (x_1, y_1, z_1, t_1) et (x_2, y_2, z_2, t_2) . Le référentiel dans lequel ces deux événements se produisent au même endroit sera appelé le **référentiel propre**. Dans ce référentiel, on aura donc $x_1 = x_2, y_1 = y_2, z_1 = z_2$. Une horloge, fixe dans ce référentiel et située à proximité du lieu où se produisent ces deux événements, mesure la durée qui les sépare. Cette durée est appelée **durée propre**.

Le temps propre ou durée propre, ΔT , est la durée séparant deux événements ayant lieu au même endroit dans un référentiel donné. Cette durée est mesurée par une horloge fixe dans ce référentiel et proche des deux événements.

Lorsque la durée entre ces deux événements est mesurée dans un autre référentiel, en mouvement rectiligne uniforme (v) par rapport au précédent, on parle de **durée mesurée**.

Le temps mesuré ou durée mesurée, $\Delta T'$, est la durée séparant deux événements mesurée par des horloges fixes dans un référentiel inertiel en mouvement rectiligne uniforme par rapport au référentiel inertiel dans lequel on mesure le temps propre. Dans ce second référentiel, les deux événements ne se produisent pas au même endroit.

c) Relation entre durée mesurée et durée propre

Les calculs montrent que : $\Delta T' = \gamma \Delta T$ avec $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$; c'est l'équation de dilatation des

temps(ou des durées). Ce facteur ne prend des valeurs réelles que si $v < c$. La valeur c de la vitesse de la lumière dans le vide est une valeur limite ne pouvant être dépassée.

Remarque : A faible vitesse, γ tend vers 1 et la durée mesurée tend vers la durée propre.

d) Contraction des longueurs

La longueur propre L d'une tige est la longueur mesurée dans un référentiel (R') dans lequel cette tige est au repos.

On considère un autre référentiel (R) qui se déplace dans la direction de la tige, à la vitesse constante $\vec{v}$ par rapport à (R'). Pour un observateur immobile dans (R), et donc en mouvement par rapport à la tige, la longueur mesurée L' de cette tige est inférieure à la longueur propre L .

Les calculs montrent alors que : $L' = \frac{1}{\gamma} L$; c'est l'équation de contraction des longueurs.

Un observateur en mouvement par rapport à un objet trouve que la longueur de cet objet, mesurée dans la direction du mouvement, est plus courte que la longueur du même objet mesurée par un observateur immobile par rapport à l'objet.

Remarque : A faible vitesse, γ tend vers 1 et la longueur mesurée tend vers la longueur propre.

4. Les transformations de Lorentz

Il s'agit du cas où les axes (Ox) et ($O'x'$) des référentiels R et R' sont choisis parallèles à la vitesse relative $v = v(R'/R)$ des deux référentiels.

On montre que, lorsqu'on passe du référentiel inertiel R au référentiel inertiel R' , les coordonnées d'un événement M se transforment selon :

$$\begin{aligned} t' &= \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} & ct' &= \gamma (ct - \beta x) & ct &= \gamma (ct' + \beta x') \\ x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} & x' &= \gamma (x - \beta ct) & \text{et réciproquement} & x &= \gamma (x' + \beta ct') \\ y' &= y & y' &= y & y &= y' \\ z' &= z & z' &= z & z &= z' \end{aligned}$$

où on pose en général : $\beta = \frac{v}{c}$ ou vectoriellement $\vec{\beta} = \frac{\vec{v}}{c}$ et $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$

Forme générale des transformations de Lorentz : Si on se place dans le cas le plus général où la vitesse relative v de R' par rapport à R n'est pas parallèle aux axes (Ox) et $(O'x')$, les équations des transformations de Lorentz peuvent s'écrire sous la forme générale suivante :

$$c t' = \gamma \left(c t - \frac{v}{c} r \right)$$

$$r' = r + (\gamma - 1) \frac{r \cdot v}{v^2} v - \gamma v t$$

Ces équations se réduisent au cas précédent quand v est parallèle (Ox) et $(O'x')$.

Intervalle d'espace-temps : Pour deux événements E_1 et E_2 séparés par $(\Delta t, \Delta x)$ dans R et respectivement $(\Delta t', \Delta x')$ dans R' , on aura :

$$c \Delta t' = \gamma (c \Delta t - \beta \Delta x)$$

$$\Delta x' = \gamma (\Delta x - \beta c \Delta t)$$

La distance Δx comme l'intervalle de temps Δt séparant ces événements ne sont pas conservés par changement de référentiel. Par contre, l'intervalle d'espace-temps Δs^2 est invariant :

$$\Delta s^2 = c^2 \Delta t^2 - \Delta x^2 = c^2 \Delta t'^2 - \Delta x'^2$$

Dilatation du temps : Pour deux événements se produisant au même point dans R' , on aura : $\Delta x' = \gamma (\Delta x - \beta c \Delta t) = 0$, et donc $\Delta x = \beta c \Delta t = v t$. L'intervalle de temps $\Delta t'$ vaut ainsi :

$$c \Delta t' = \gamma (c \Delta t - \beta \Delta x) ; \quad \Delta t' = \gamma (1 - \beta^2) \Delta t = \frac{1}{\gamma} \Delta t \quad \text{d'où} \quad \Delta t = \gamma \Delta t' > \Delta t'$$

Le temps semble s'écouler plus lentement dans le référentiel R' .

Composition des vitesses : A partir des transformations de Lorentz, on dérive la loi de composition des vitesses :

$$\begin{aligned} u'_x &= \frac{dx'}{dt'} = \frac{u_x - v}{1 - \frac{v u_x}{c^2}} \\ u'_y &= \frac{dy'}{dt'} = \frac{1}{\gamma} \frac{u_y}{1 - \frac{v u_x}{c^2}} \\ u'_z &= \frac{dz'}{dt'} = \frac{1}{\gamma} \frac{u_z}{1 - \frac{v u_x}{c^2}} \end{aligned}$$

Et réciproquement :

$$\begin{aligned} u_x &= \frac{dx}{dt} = \frac{u'_x + v}{1 + \frac{v u'_x}{c^2}} \\ u_y &= \frac{dy}{dt} = \frac{1}{\gamma} \frac{u'_y}{1 + \frac{v u'_x}{c^2}} \\ u_z &= \frac{dz}{dt} = \frac{1}{\gamma} \frac{u'_z}{1 + \frac{v u'_x}{c^2}} \end{aligned}$$

5. Quadrivecteurs

Les équations de changement de référentiel de la relativité restreinte conduisent naturellement à utiliser un objet mathématique baptisé **quadrivecteur**, dont les composantes se transforment selon les équations des transformations de Lorentz. L'objectif est ensuite d'écrire les lois de la physique dans ce formalisme quadrvecteuriel, pour obtenir des relations invariantes de Lorentz, i.e. indépendantes du choix du référentiel inertiel.

Un quadrivecteur quelconque A possède ainsi une composante temporelle $A^0 = A^t$, et une composante spatiale $A = \{A^x, A^y, A^z\}$

Le quadrivecteur position r : $r = (ct \ x \ y \ z)$; $r^2 = c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2$

Le quadrivecteur vitesse : $U = \frac{dr}{dt} = (\gamma(u)c \ \gamma(u)u)$ avec $u = \frac{dr}{dt}$; $U^2 = c^2$

Le quadrivecteur impulsion - énergie : $p = m \frac{dr}{dt} = m U = (\gamma(u)mc \ \gamma(u)mu) = \left(\frac{E}{c} = \gamma(u)mc \ p = \gamma(u)mu \right)$

Dans cette relation, m est la masse propre de l'objet (c'est-à-dire sa masse au repos)

$$p^2 = m^2 c^2 = \left(\frac{E}{c} \right)^2 - p^2 \quad \text{i.e.} \quad E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

6. Quantité de mouvement relativiste

On considère une particule de masse m se déplaçant dans le vide à la vitesse $\vec{v}$.

En mécanique classique, la quantité de mouvement est donnée par : $\vec{p} = m \vec{v}$

En mécanique relativiste, la quantité de mouvement est donnée par : $\vec{p} = \gamma m \vec{v}$

La valeur de la quantité de mouvement relativiste est : $p = \gamma m v$.

Remarque : A faible vitesse, γ tend vers 1 et la quantité de mouvement relativiste tend vers la quantité de mouvement classique.

7. Energie relativiste

a) Energie cinétique relativiste

L'énergie cinétique relativiste a pour expression : $E_c = (\gamma - 1) mc^2$

Remarque : A faible vitesse, γ tend vers 1, mais pour retrouver l'expression classique de l'énergie cinétique, il faut utiliser un développement limité.

$$\text{On a : } E_c = (\gamma - 1) mc^2 ; \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-\frac{1}{2}} = \left(1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}}$$

A faible vitesse, v est très inférieure à c et $\left(\frac{v}{c} \right)^2$ tend vers 0.

Or, lorsque x tend vers 0, on a : $(1+x)^n \approx 1 + nx + \frac{n(n-1)}{2!} x^2 + \dots$

En posant $x = -\left(\frac{v}{c} \right)^2$ et $n = -\frac{1}{2}$, on peut donc écrire :

$$\gamma = \left(1 - \left(\frac{v}{c} \right)^2 \right)^{-\frac{1}{2}} \approx 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right)^2 + \frac{3}{8} \left(\frac{v}{c} \right)^4 + \dots$$

En négligeant les termes de puissance supérieure à 2 par rapport aux deux premiers de l'expression précédente, on obtient : $\gamma \approx 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right)^2$

L'énergie cinétique s'exprime alors par : $E_c \approx (1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c} \right)^2 - 1)mc^2 \approx \frac{1}{2} mv^2$, on retrouve bien l'expression classique de l'énergie cinétique.

b) Energie de masse

L'équivalence masse – énergie est donnée par : $E_0 = mc^2$, cette grandeur E_0 est l'énergie de masse de la particule.

c) Energie relativiste

L'énergie cinétique relativiste a pour expression : $E_c = (\gamma - 1) mc^2 = \gamma mc^2 - mc^2$, on en déduit que : $\gamma mc^2 = E_c + mc^2$; $\gamma mc^2 = E_c + E_0$

La grandeur γmc^2 est l'énergie totale E de la particule. Elle est égale à la somme de son énergie cinétique et de son énergie de masse : $E = \gamma mc^2$, d'où $E = E_c + E_0$.

L'énergie totale peut être écrite en fonction de la quantité de mouvement : $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$

Cela s'écrit aussi : $E^2 - p^2c^2 = m^2c^4$, la masse m et la valeur c de la vitesse de la lumière dans le vide étant invariantes, on en déduit que la quantité $E^2 - p^2c^2$ est aussi invariante par changement de référentiel inertiel.

8. Quelques conséquences pour le photon

a) Vitesse

A partir de l'expression de l'énergie relativiste, on peut écrire : $E/\gamma = mc^2$

La masse d'un photon étant nulle et c^2 n'étant pas infini, le rapport E/γ vaut zéro.

Un photon transportant une énergie non nulle, cela signifie que, pour un photon, γ est infini.

Pour que γ soit infini, il faut que la vitesse du photon soit égale à c .

b) Quantité de mouvement

On associe une radiation de fréquence ν et de longueur d'onde dans le vide λ à un photon d'énergie E . On a alors : $E = h\nu = hc/\lambda$

Comme sa masse est nulle, l'énergie du photon s'exprime aussi par $E^2 = p^2c^2$ (car le terme m^2c^4 est nul). En combinant les deux équations, il vient : $E = pc = hc/\lambda$; ce qui conduit à : $p = h/\lambda$

C'est la relation de De Broglie de la dualité onde – particule.

Annexe

Quelques repères historiques

- Mécanique classique : Sir Isaac NEWTON (1663 – 1727).
1687 : Lois de l'attraction universelle – Lois de KEPLER pour les planètes.
- Théorie ondulatoire de la lumière et du rayonnement électromagnétique : James Clerk MAXWELL (Edimbourg 1831 – Cambridge 1879) ;
1860 : Théorie cinétique des gaz ;
1873 : Traité d'électricité et de magnétisme – les 4 équations de Maxwell.
- 1853 : Observation de la première raie d'émission de l'atome d'hydrogène par Anders Jonas ANGSTROM (Uppsala 1814 – 1874).
- Lord RAYLEIGH (1842 – 1919) – Loi de Rayleigh et Jeans (1900) pour le rayonnement du corps noir – démarche de physique classique. Catastrophe ultraviolette.
- 1887 : HERTZ découvre l'effet photoélectrique.
- 1894 – 1895 : Découverte de l'électron grâce aux expériences de Jean Perrin et J.J. Thomson.
- 1900 : Formule de Max PLANCK (1858 – 1947) Rayonnement du corps noir – L'énergie cédée par un corps à la lumière qu'il émet (qu'il rayonne) est donnée sous forme de quanta. 1918 : Prix Nobel.
- 1905 <<Année magique>> : Albert EINSTEIN (Ulm 1879 – 1955) explique l'effet photoélectrique par l'aspect corpusculaire de la lumière = photon d'énergie $h\nu$.
1921 : Prix Nobel sur l'explication de l'effet photoélectrique. Ce sera le seul Prix Nobel d'Einstein.
1905 : Albert EINSTEIN – Théorie de la relativité.
- 1911 : Premier congrès SOLVAY à Bruxelles. Les congrès SOLVAY sont des conférences scientifiques réunissant les plus grands scientifiques de l'époque. Ces conseils permirent des avancées importantes en mécanique quantique. Ils furent organisés grâce au mécénat d'Ernest Solvay, un chimiste et industriel belge. Pendant longtemps, Marie Curie fut la seule femme ayant participé à un conseil Solvay.
- 1913 : Neils Henrik David BOHR (1885 – 1962) explique les spectres de l'atome d'H par le modèle dit de <<l'atome de Bohr>> - modèle semi-classique car quantification du moment cinétique + notion de trajectoire = modèle génial mais faux. 1922 : Prix Nobel.

- 1914 : Expérience de J. FRANCK et G. HERTZ : Quantification des niveaux d'énergie. Explication par N. BOHR. 1925 : Prix Nobel J. FRANCK et G. HERTZ .
- 1923 : Effet Compton – Arthur Holly COMPTON (1892 – 1962). 1927 : Prix Nobel. Au photon est associée une énergie $h\nu$ et une impulsion $h\nu/c$.
- 1924 : Louis Victor Pierre Raymond, duc de BROGLIE (1892 – 1987) introduit la notion de dualité Onde – corpuscule. 1929 : Prix Nobel.
- 1925 : Werner Karl HEISENBERG (1901 – 1976) – Première formalisation de la Mécanique Quantique (formalisme matriciel). 1932 : Prix Nobel.
- 1926 : Erwin Rudolf Josef Alexander SCHRODINGER (1887 – 1961) – Théorie de la Mécanique Ondulatoire (équations différentielles) – Les équations de Schrödinger. 1933 : Prix Nobel, partagé avec DIRAC.
- 1927 : Congrès SOLVAY à Bruxelles avec I. LANGMUIR, M. PLANCK, M. CURIE, H.A. LORENTZ, A. EINSTEIN, P. LANGEVIN, W. RICHARDSON, P. DEBYE, W.L. BRAGG, H.A. KRAMERS, P. DIRAC, A.H. COMPTON, L. de BROGLIE, M. BORN, N. BOHR, P. EHRENFEST, E. SCHRODINGER, W. PAULI, W. HEISENBERG, R.H. FOWLER,
- 1927 : Expérience de C.J. DAVISSON et L.H. GERMER : réflexion des électrons par la surface d'un cristal. Et indépendamment en 1928 : G.P. THOMSON : transmission des électrons par un mince film cristallin. 1937 : Prix Nobel C.J. DAVISSON et G.P. THOMSON. Ces deux expériences confirment la théorie ondulatoire de Louis de BROGLIE en mettant en évidence la nature ondulatoire de l'électron, par diffraction sur un cristal.
- 1927 : Principe d'incertitude de HEISENBERG.
- 1930 : Paul Maurice Adrien DIRAC (1902 – 1984) établit le formalisme général de la Mécanique Quantique. 1933 : Prix Nobel partagé avec SCHRODINGER.
- 1933 : Ernst RUSKA construit le premier microscope électronique par transmission. 1986 : Prix Nobel partagé avec G. BINING et H. ROHRER pour ses travaux sur le microscope électronique, 53 ans après !
- 1947 : Les américains John Bardeen, William Shockley et Walter Brattain, chercheurs de la compagnie Bell Téléphone, découvrent l'effet Transistor. Ils ont reçu le prix Nobel de physique en 1956.
- 1957 : Théorie complète de la supraconductivité par John Bardeen, Leon N. Cooper et John Robert Schrieffer. Prix Nobel de physique en 1972.
- 1960 : Le physicien américain Théodore Maiman obtint pour la première fois une émission laser au moyen d'un cristal de rubis.
- 1965 : S.I. Tomonaga, J. Schwinger et R.P. Feynman reçoivent le prix Nobel de physique pour leurs contributions à l'électrodynamique quantique.

- 1981 : Mise au point du microscope à effet tunnel (STM) par G. BINING et H. ROHRER (IBM Zurich) pour <<voir>> la forme des atomes. 1986 : Prix Nobel.
- 1997 : Prix Nobel de Physique Claude COHEN-TANNOUDJI (1933 -) <<Manipulating Atoms with Photons>>. Ouvrage de référence en Mécanique Quantique : C. COHEN TANNOUDJI, B. DIU, F. LALOE <<Mécanique Quantique>>, éditeur : HERMANN.