PHYS-H-200 Physique quantique et statistique
Chapitre 4: principes de la mécanique quantique

Jean-Marc Sparenberg
Université Libre de Bruxelles

2011-2012

1. Postulats sur l’état d’un système isolé et son évolution
2. Propriétés mathématiques
3. Postulats sur les résultats de mesures et relations d’incertitude
4. Postulat sur l’état d’un système après une mesure

La fonction d'onde et son interprétation probabiliste

Postulat sur l'état d'un système (une particule)

L'état physique d'une particule à un instant t est caractérisée par une fonction d'onde complexe normée $\psi(\vec{r},t)$. Le carré du module $|\psi(\vec{r},t)|^2$ de cette fonction donne la densité de probabilité de présence de cette particule au point $\vec{r}$ à l'instant t.

- Position de la particule indéterminée ; probabilité de présence $\mathcal{P}(D,t)$ dans domaine D à l'instant t : $\mathcal{P}(D,t) = \int_D |\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r}$
- Expérimentalement : N systèmes identiques, dont $n(D,t)$ pour lesquels la particule est dans $D \Rightarrow \quad \mathcal{P}_{\text{exp}}(D,t) = \lim_{N\to\infty} n(D,t)/N$
- Domaine infinitésimal $d\vec{r}$ (théorème moyenne) : $\mathcal{P}(d\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)d\vec{r}$ où $\rho(\vec{r},t) = |\psi(\vec{r},t)|^2$ = probabilité de présence par unité de volume
- Seule certitude : particule quelque part dans l'espace accessible $\mathbb{R}^3$

$$\Rightarrow \mathcal{P}\left(\mathbb{R}^3, t\right) = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\vec{r},t)|^2 d\vec{r} \equiv \|\psi(t)\|^2 = 1 \quad \text{fonction d'onde normée}$$

$$\Rightarrow \psi(\vec{r},t) \in L^2(\mathbb{R}^3), \forall t \quad \text{fonction de carré sommable}$$

Principe de superposition et interférences

- Deux fonctions d'onde, $\psi_1(\vec{r},t)$ et $\psi_2(\vec{r},t)$, avec $\rho_i(\vec{r},t) = |\psi_i(\vec{r},t)|^2$
  $\Rightarrow$ combinaison linéaire (à la fois ψ_1 et ψ_2) = fonction d'onde possible

$$\psi(\vec{r},t) = \lambda_1\psi_1(\vec{r},t) + \lambda_2\psi_2(\vec{r},t), \quad \lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$$

- Densité de probabilité $\Rightarrow$ terme d'interférence (cf deux fentes)

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{r},t) &= \psi^*(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) = |\lambda_1|^2|\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2|\psi_2|^2 + \lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*\psi_2 + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1\psi_2^* \\
&= |\lambda_1|^2\rho_1(\vec{r},t) + |\lambda_2|^2\rho_2(\vec{r},t) + \underbrace{2\,\mathrm{Re}\left[\lambda_1^*\lambda_2\;\psi_1^*(\vec{r},t)\psi_2(\vec{r},t)\right]}_{\text{interférence}} \\
&\neq |\lambda_1|^2\rho_1(\vec{r},t) + |\lambda_2|^2\rho_2(\vec{r},t)
\end{aligned}$$

- Application : q-bit ordinateurs quantiques : $\psi_{\text{q-bit}} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_0 + \psi_1]$

  Exemple : polarisation photon : $\psi_{\nearrow} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{\leftrightarrow} + \psi_{\updownarrow}]$
- Interprétations de la fonction d'onde
  - mathématiques : fonction d'onde = amplitude de probabilité
    « interprétation de Copenhague » (Bohr, Born, Heisenberg, 1924-1927)
  - physiques : fonction d'onde = onde porteuse, particule...
    (de Broglie, Schrödinger, Bohm) mais difficulté de la non-localité

Évolution déterministe d'un système isolé

Postulat sur l'évolution du système

L'évolution du système au cours du temps est régie par l'équation de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = H\psi(\vec{r},t)$ où H est l'observable (opérateur) associée à l'énergie du système.

- Équation différentielle du premier ordre en t
  - évolution déterministe du système, fixée par la condition initiale $\psi(\vec{r},0)$
  - cf équations de Newton (Hamilton) en mécanique classique $\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} \\ \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{F} \end{array} \right.$
- Opérateur hamiltonien H linéaire $\Rightarrow$ principe de superposition

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\lambda_1\psi_1(\vec{r},t) + \lambda_2\psi_2(\vec{r},t)\right] &= i\hbar\lambda_1\frac{\partial\psi_1}{\partial t} + i\hbar\lambda_2\frac{\partial\psi_2}{\partial t} \\ &= \lambda_1 H\psi_1 + \lambda_2 H\psi_2 = H\left[\lambda_1\psi_1(\vec{r},t) + \lambda_2\psi_2(\vec{r},t)\right] \end{aligned}$$

- Espace des solutions = espace vectoriel, muni d'une norme
  $\Rightarrow$ espace des fonctions de carré sommable $L^2\left(\mathbb{R}^3\right)$

Espace des fonctions d'onde et produit scalaire

- Fonctions d'onde physiques (une particule à un temps t donné)

$$\psi(\vec{r}) \quad \in \quad L^2\left(\mathbb{R}^3\right) \cap C^2\left(\mathbb{R}^3\right)$$

  - ondes planes $\notin L^2$ mais paquets d'onde $\in L^2$
  - espace fonctionnel de dimension infinie

- Produit scalaire et notation de Dirac ($\neq$ notation algèbre linéaire !)

$$\langle\phi|\psi\rangle \equiv \underbrace{\int d\vec{r}\,\phi^\star(\vec{r})}_{\langle\phi|}\,\underbrace{\psi(\vec{r})}_{|\psi\rangle} = \langle\psi|\phi\rangle^\star \quad \in \mathbb{C}$$

  - « ket » $|\psi\rangle$ = élément de l'espace fonctionnel
  - « bra » $\langle\phi|$ = élément de l'espace dual (forme $L^2 \to \mathbb{C} : |\psi\rangle \to \langle\phi|\psi\rangle$)
  - fonctions orthogonales $\iff \quad \langle\phi|\psi\rangle = 0$

- Norme $\quad ||\psi|| = \langle\psi|\psi\rangle^{1/2} = \left[\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r}\right]^{1/2} \quad$ ($< \infty$ si $\psi \in L^2$)
  - fonctions orthonormées $\iff \quad \langle\phi|\psi\rangle = 0, \quad \langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$
  - si $\psi(\vec{r})$ est normalisable, $\psi(\vec{r})/||\psi||$ est normée
  - espace préhilbertien, peut être complété en espace de Hilbert

Opérateurs et opérateurs hermitiques (cf algèbre linéaire)

- Opérateur A : application $L^2 \to L^2$: $\psi(\vec{r}) \to \phi(\vec{r}) = A\psi(\vec{r})$, $\quad |\phi\rangle = A|\psi\rangle$
  - A linéaire $\iff A[\lambda_1\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2\psi_2(\vec{r})] = \lambda_1 A\psi_1(\vec{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\vec{r})$
  - A hermitique $\iff \int \phi^\star(\vec{r})A\psi(\vec{r})d\vec{r} = \left[\int \psi^\star(\vec{r})A\phi(\vec{r})d\vec{r}\right]^\star, \quad \forall \phi, \psi$

    $$\langle\phi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A|\phi\rangle^\star$$
- Valeur propre a et fonction propre $u_a(\vec{r})$ de A : $\quad A\, u_a(\vec{r}) = a\, u_a(\vec{r})$
- Valeur propre a dégénérée, degré de dégénérescence d_a

  $\iff \exists\, d_a$ fonctions propres linéairement indépendantes pour a formant un sous-espace propre (sous-espace vectoriel, dimension d_a)
- Spectre d'un opérateur : ensemble de ses valeurs propres
  - spectre discret $\iff$ toutes valeurs propres discrètes (isolées)
  - spectre continu $\iff$ toutes valeurs propres continues (non isolées)
- Propriétés des opérateurs hermitiques
  - $\langle\psi|A|\psi\rangle = \int \psi^\star(\vec{r})A\psi(\vec{r})d\vec{r} = \langle\psi|A|\psi\rangle^\star$ réel
  - valeurs propres réelles : $\quad A|u_a\rangle = a|u_a\rangle \quad \Rightarrow \quad a = a^\star$
  - les fonctions propres de valeurs propres distinctes sont orthogonales :

    $A|u_1\rangle = a_1|u_1\rangle, \quad A|u_2\rangle = a_2|u_2\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle u_2|u_1\rangle = 0$ si $a_1 \neq a_2$

    $\Rightarrow$ ensemble de fonctions propres orthonormées : $\quad \langle u_a|u_{a'}\rangle = \delta_{aa'}$

Exemples d'opérateurs hermitiques (sur $L^2(\mathbb{R})$)

- Opérateur multiplicatif par x : hermitique

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^\star(x) x \psi(x) dx = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^\star(x) x \phi(x) dx \right]^\star$$

- Opérateur différentiel $\frac{\partial}{\partial x}$: pas hermitique

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^\star(x) \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx = \left[\phi^\star(x) \psi(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi^\star(x) dx$$

$$= - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi^\star(x) dx = - \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^\star(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi(x) dx \right]^\star$$

- Opérateur différentiel $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$: hermitique

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^\star(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x) dx &= - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi^\star(x) dx \\ &= + \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^\star \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi(x) dx \right]^\star \end{aligned}$$

Observables et commutateurs

- Opérateur A = observable $\Longleftrightarrow$ A hermitique et $\{u_a(\vec{r})\}$ = base
  - développement de Fourier $\psi(\vec{r}) = \sum_a C_a u_a(\vec{r})$, avec $C_a = \langle u_a|\psi\rangle$
  - exemples : p_x (fonctions propres = ondes planes), x, H...
- Produit d'opérateurs non commutatif en général : $AB\psi(\vec{r}) \neq BA\psi(\vec{r})$
  $\Rightarrow$ commutateur de A et B = nouvel opérateur $[A,B] = AB - BA$
  - exemple (1 dimension) : x et p_x ne commutent pas : $[x,p_x] = i\hbar$

$$[x,p_x]\,f(x) = (xp_x - p_x x)\,f(x) = -i\hbar\left\{x\frac{df}{dx} - \frac{d(xf)}{dx}\right\} = +i\hbar\,f(x), \qquad \forall f$$

  - généralisation : $[x_j,p_k] = i\hbar\delta_{jk} \quad (j,k = x,y,z)$
  - opérateurs A et B canoniquement conjuguées $\Longleftrightarrow$ $[A,B] = i\hbar$

Théorème sur les observables qui commutent

Deux observables A et B commutent $\Longleftrightarrow$ elles possèdent un ensemble complet (base) de fonctions propres communes u_{ab}.

- $Au_{ab}(\vec{r}) = au_{ab}(\vec{r}), \quad Bu_{ab}(\vec{r}) = bu_{ab}(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad AB = BA$
  car $(AB - BA)u_{ab} = Abu_{ab} - Bau_{ab} = abu_{ab} - bau_{ab} = 0, \quad \forall u_{ab}$
- $AB = BA, \quad Bu_b(\vec{r}) = bu_b(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad Au_b(\vec{r}) = au_b(\vec{r})$ (b non dégénérée)
  car $B(Au_b) = BAu_b = ABu_b = Abu_b = b(Au_b) \quad \Rightarrow \quad Au_b \propto u_b$

Postulat sur la description des grandeurs physiques

Une grandeur physique mesurable est décrite par une observable.

- Lien entre notion physique (grandeur qui peut être mesurée) et notion mathématique (opérateur hermitique avec base d'états propres)
- Exemples :
  - position 1D : x, position 3D : $\vec{r}$ ou x, y, z
  - vitesse 1D : $-i\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{d}{dx}$, impulsion 3D : $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$
  - énergie totale : opérateur hamiltonien $H = \dfrac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$
- Construction des observables par la règle de correspondance : grandeur classique $A\,(\vec{r},\vec{p}) \rightarrow$ opérateur $A\left(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}\right)$ après symétrisation des opérateurs qui ne commutent pas
  - exemple : $\vec{r}\cdot\vec{p} \rightarrow \frac{1}{2}\,(\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r}) = -\frac{1}{2}i\hbar\,\left(\vec{r}\cdot\vec{\nabla}+\vec{\nabla}\cdot\vec{r}\right)$
- Il existe des observables sans équivalent classique (exemple : spin)
  $\Rightarrow$ physique quantique plus générale que physique classique

Postulat sur la mesure d'une grandeur physique

La mesure d'une grandeur physique ne peut donner comme résultat qu'une des valeurs propres a de l'observable A correspondantes.

- A = opérateur hermitique $\Rightarrow$ valeurs propres a réelles
- Valeurs propres discrètes $\Rightarrow$ quantification des résultats
- Exemple : équation de Schrödinger stationnaire $H\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$
  $\Rightarrow$ quantification de l'énergie E_i

Postulat sur la probabilité d'un résultat

On mesure l'observable A sur un système de fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$.
La probabilité d'obtenir la valeur propre a est $\mathcal{P}(a,t) = |\langle u_a|\psi(t)\rangle|^2$,
où $u_a(\vec{r})$ est la fonction propre normée de A correspondant à a.

- $\{u_a(\vec{r})\}$ = base orthonormée $\Rightarrow \psi(\vec{r}, t) = \sum_a C_a(t)u_a(\vec{r})$, $C_a(t) = \langle u_a|\psi(t)\rangle$
  $\Rightarrow$ probabilité $\mathcal{P}(a,t) = |C_a(t)|^2$
- Fonction d'onde normée : $1 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{aa'} C_a^\star C_{a'}\langle u_a|u_{a'}\rangle = \sum_a |C_a|^2$
  $\Rightarrow$ probabilité totale $\displaystyle\sum_a \mathcal{P}(a,t) = 1$ (certitude d'avoir un résultat)

Valeur moyenne et écart quadratique moyen

- Pour un grand nombre de particules de fonction d'onde $\psi(\vec{r})$
  - valeur moyenne de la composante x de leurs positions

$$\langle x\rangle_\psi = \int x\rho(\vec{r})d\vec{r} = \int \psi^\star(\vec{r})x\psi(\vec{r})d\vec{r} = \langle\psi|x|\psi\rangle$$

  - écart quadratique moyen ou incertitude sur x

$$(\Delta x)_\psi = \left[\int \left(x - \langle x\rangle_\psi\right)^2 \rho(\vec{r})d\vec{r}\right]^{1/2} = \langle\psi|\left(x - \langle x\rangle_\psi\right)^2|\psi\rangle^{1/2} = \left\langle\left(x - \langle x\rangle_\psi\right)^2\right\rangle_\psi^{1/2}$$

- Généralisation à une observable A quelconque
  - valeur moyenne (réelle car A hermitique) : $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|A|\psi\rangle$

$$= \int \underbrace{\psi^\star(\vec{r})}_{\sum_{a'} C^\star_{a'}u^\star_{a'}} \; A \; \underbrace{\psi(\vec{r})}_{\sum_a C_a u_a} \; d\vec{r} = \sum_{aa'} C^\star_{a'} C_a a \underbrace{\int u^\star_{a'}(\vec{r})u_a(\vec{r})d\vec{r}}_{\delta_{aa'}} = \sum_a a\,\mathcal{P}(a)$$

  - écart quadratique ou incertitude : $(\Delta A)_\psi = \left\langle\left(A - \langle A\rangle_\psi\right)^2\right\rangle_\psi^{1/2}$

- Exemple : $\langle p_x\rangle_\psi = -i\hbar\int \psi^\star(\vec{r})\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})d\vec{r} \neq -i\hbar\int \frac{\partial}{\partial x}\rho(\vec{r})d\vec{r}$ (imaginaire)

Relations d'incertitude (Heisenberg, 1927)

- Relation d'incertitude position/impulsion

$$[x, p_x] = i\hbar \qquad \underbrace{\Rightarrow}_{\text{voir annexe 4F}} \qquad (\Delta x)_\psi \, (\Delta p_x)_\psi \geq \frac{1}{2}\hbar$$

- Incertitudes fondamentales, bien définies mathématiquement $\neq$ imprécisions des mesures ou erreurs expérimentales
- Interprétation : le choix de ψ permet de minimiser soit $(\Delta x)_\psi$ (position très bien connue), soit $(\Delta p_x)_\psi$ (vitesse très bien connue), mais pas les deux simultanément
- Exemples 1D :
  - onde plane : vitesse parfaitement connue, totalement délocalisée
  - paquet d'ondes : incertitude en x et k
  - paquet d'ondes infiniment étroit, $\delta_{x_0}(x)$: k totalement indéterminé
- Généralisation : observables conjuguées canoniquement

$$[A, B] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad (\Delta A)_\psi \, (\Delta B)_\psi \geq \frac{1}{2}\hbar$$

Définition d'un appareil de mesure

- Système physique dont la fonction d'onde M doit être couplée à la fonction d'onde ψ du système microscopique mesuré

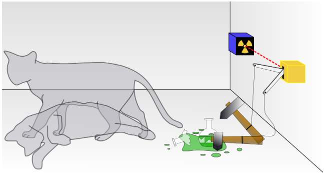
$$\psi_1 \to M_1, \quad \psi_2 \to M_2$$

- Système macroscopique pour permettre une lecture $\Rightarrow$ description en termes de physique quantique difficile, voire impossible
- Si évolution du système total (système mesuré + appareil) régi par équation de Schrödinger, problème de la superposition d'états macroscopiques distincts

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \quad \to \quad \lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2$$

- Souligné par le paradoxe du chat (Schrödinger, 1935)
  - noyau : $\lambda_1\psi_{\text{désintégré}} + \lambda_2\psi_{\text{non désintégré}}$
  - chat : $\to \quad \lambda_1 M_{\text{mort}} + \lambda_2 M_{\text{vivant}}$

  $\Rightarrow$ chat à la fois mort et vivant (tant que boite fermée ?)



[Wikipedia]

Décohérence

- Observation : systèmes macroscopiques, en particulier appareils de mesure : jamais dans des superpositions d'états distincts
- Embryon d'explication : décohérence (= perte cohérence entre états superposés), due à l'interaction (complexe !) avec l'environnement, rapide (vitesse croissante avec taille environnement) et irréversible

$$\lambda_1 M_1 + \lambda_2 M_2 \quad \rightarrow \quad M_1 \text{ (probabilité : } |\lambda_1|^2\text{) ou } M_2 \text{ (probabilité : } |\lambda_2|^2\text{)}$$

- Décohérence = problème majeur en informatique quantique : difficulté d'isoler un q-bit de son environnement tout en étant capable de le manipuler (lecture, écriture...)
- Résolution paradoxe du chat : décohérence dans l'appareil de mesure de la radioactivité (par exemple, compteur Geiger)
  $\Rightarrow$ tout est déjà joué au moment de cette détection
- Décohérence pas déduite de la mécanique quantique (difficulté modélisation système macroscopique très instable)
  $\Rightarrow$ postulat supplémentaire, à l'heure actuelle

Postulat sur la réduction de la fonction d'onde

Immédiatement après une mesure de l'observable A ayant donné le résultat a, la fonction d'onde du système, s'il existe encore, est égale à la fonction propre normée $u_a(\vec{r})$: $\widetilde{\psi}(\vec{r}, t^+_{\text{mesure}}) = u_a(\vec{r})$.

- Reproductibilité : si on recommence la mesure immédiatement après

$$\widetilde{\mathcal{P}}(a,t) = |\langle u_a|\widetilde{\psi}\rangle|^2 = |\langle u_a|u_a\rangle|^2 = 1$$

- Nécessité que la mesure soit (partiellement) non destructive : le système mesuré doit encore exister à la suite de la mesure
- Perturbation (si pas destruction !) du système (microscopique) par l'appareil de mesure (macroscopique), de manière irréversible
- Exemples :
  - mesure polarisation photon $\nearrow$ à travers polariseur $\updownarrow$:
    photon absorbé (détruit) si $\leftrightarrow$ ou transmis si $\updownarrow$ (probabilités : 50%)
  - expérience des deux fentes : particule (photon, électron...) absorbée par l'écran $\Rightarrow$ mesure destructive