

QUANTIQUE

Denis Gialis

Sommaire

I - Le formalisme hilbertien	1
II - L'évolution temporelle	5
III - Le comportement spatial	8
IV - La dynamique du quanton	12
V - Comportements collectifs de quantons identiques	23
VI - Le moment angulaire	25
Annexe 1 : Potentiels centraux et atome d'hydrogène	33
Annexe 2 : Oscillateur harmonique	40

I - Le formalisme hilbertien

Un **espace de Hilbert**, noté H , est un \mathbb{C} -espace vectoriel muni d'un produit scalaire dont la forme quadratique associée est réelle et définie positive.

Un produit scalaire sur H est une forme **sesquilinéaire** et **hermitique** qui à tout couple (u, v) de vecteurs de H associe un complexe noté $\langle u | v \rangle$:

$\forall (u, v, w) \in H^3$ et $\forall (\lambda, \mu) \in \mathbb{C}^2$, on a ;

(1) La sesquilinearité :

$$\begin{cases} \langle w | \lambda \cdot u + \mu \cdot v \rangle = \lambda \cdot \langle w | u \rangle + \mu \cdot \langle w | v \rangle \\ \langle \lambda \cdot u + \mu \cdot v | w \rangle = \bar{\lambda} \cdot \langle u | w \rangle + \bar{\mu} \cdot \langle v | w \rangle \end{cases}$$

(2) L'hermiticité :

$$\langle u | v \rangle = \overline{\langle v | u \rangle}$$

La forme quadratique associée est telle que :

$$\langle v | v \rangle \geq 0$$

$$\langle v | v \rangle = 0 \Leftrightarrow v = 0$$

Une norme sur H est définie par $\|v\| = \langle v | v \rangle^{1/2}$.

Inégalité de Schwarz :

$$|\langle u | v \rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\|$$

Soit H un espace de Hilbert de dimension finie n et $\{u_k\}_{k=0..n}$ une base de H , alors $\forall v \in H$,

$$v = \sum_{k=1}^n |u_k\rangle \langle u_k | v \rangle \text{ et } \|v\|^2 = \sum_{k=1}^n |\langle u_k | v \rangle|^2$$

Espaces des états

Grandeurs physiques, états et valeurs propres

L'état d'un système quantique ne peut en général être caractérisé par des valeurs numériques attribuées aux diverses grandeurs physiques qui le caractérisent. A une grandeur physique quantique A correspond un ensemble d'**états propres** $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ et de **valeurs propres** associées $\{a_n\}_{n \in \mathbb{N}}$. Les états propres présentent quant à leurs probabilités de transition les propriétés de

(1) **disjonction** : $\forall (n, n') \in \mathbb{N} / n \neq n', P(u_n \leftarrow u_{n'}) = 0$

(2) **complétude** : Pour tout état v , $\sum_n P(u_n \leftarrow v) = 1$

Une mesure de la grandeur A sur un système dans un état initial quelconque v fournit l'une des valeurs propres a_n avec la probabilité de transition $P(u_n \leftarrow v)$, et l'état du système est alors projeté vers l'état u_n . Le système est dans l'état final u_n .

Amplitudes de transition

L'état d'un système quantique est représenté par un vecteur, normé à l'unité, d'un espace de Hilbert appelé **espace des états** du système.

L'**amplitude de transition** entre deux états est donnée par le produit scalaire des vecteurs correspondants. La probabilité de transition s'écrit alors :

$$P(v \leftarrow u) = |\langle v | u \rangle|^2 \text{ et } P(v \leftarrow u) \leq 1$$

De plus, $P(v \leftarrow v) = 1$.

Un ensemble disjoint d'états est représenté par une famille de vecteurs orthogonaux.

Ainsi, une famille complète et disjointe d'états d'un système quantique est représentée par une base orthonormée de l'espace des états du système.

Cependant, deux vecteurs normés de H ne différant que par une phase représentent le même état physique ; on dit qu'un état d'un système quantique est représenté de façon unique par un rayon unitaire de l'espace des états.

Opérateurs

On appelle **opérateur** dans l'espace de Hilbert H une application linéaire de H dans H .

Un opérateur T fait ainsi correspondre à tout vecteur v de H un vecteur $T \cdot v$ de H .

Si on choisit une base $B = \{u_k\}_{k=0..n}$ de H , on associe à T la matrice T dont un élément t_{kl} s'écrit ;

$$t_{kl} = \langle u_k | u_l \rangle.$$

Tout opérateur T de H possède un adjoint T^* , un opérateur tel que

$$\forall (u, v) \in H, \langle u | T \cdot v \rangle = \langle T^* \cdot u | v \rangle = \overline{\langle v | T^* \cdot u \rangle}$$

La matrice associée à T^* est égale à la transposée de la matrice conjuguée de T :

$$T^* = {}^t \overline{T}$$

Un opérateur U est dit **unitaire** si et seulement si $U^* \cdot U = U \cdot U^* = I$.

Un opérateur unitaire laisse invariants les produits scalaires c'est-à-dire :

$$\forall (u, v) \in H^2, \langle U \cdot u | U \cdot v \rangle = \langle u | v \rangle.$$

Un opérateur A est dit **hermitique** s'il est identique à son adjoint c'est-à-dire si

$$\forall (u, v) \in H^2, \langle u | A \cdot v \rangle = \langle A \cdot u | v \rangle \text{ ou encore } A = A^*.$$

Si l'opérateur A est hermitique alors l'opérateur U tel que $U = \exp(i \cdot A)$ est unitaire.

Grandeurs physiques et opérateurs

Une grandeur physique d'un système quantique est représentée par un opérateur hermitique dans l'espace de Hilbert des états du système. Les valeurs numériques de la grandeur sont les valeurs propres de l'opérateur. Les états propres de la grandeur sont décrits par les vecteurs propres de l'opérateur qui forment une base de l'espace des états. On prendra la même notation pour l'opérateur et pour la matrice associée.

On appelle **décomposition spectrale** de l'opérateur A l'expression de l'opérateur qui s'écrit

$$A = \sum_k a_k \cdot |k\rangle\langle k| = \sum_k a_k \cdot \Pi_k \text{ où } \Pi_k \text{ est le projecteur sur } |k\rangle.$$

La valeur moyenne de la grandeur A dans un état v quelconque, notée $\langle A \rangle_v$, est telle que

$$\langle A \rangle_v = \sum_k a_k \cdot P_k(v) = \langle v|A|v \rangle$$

où $P_k(v) = |\langle k|v \rangle|^2$, a_k étant la valeur propre associée au vecteur propre $|k\rangle$ caractérisant la grandeur A .

De même pour une fonction f de A , on a $\langle f(A) \rangle_v = \langle v|f(A)|v \rangle$.

Deux grandeurs physiques A et B sont **compatibles** si, et seulement si, les opérateurs A et B qui les représentent commutent c'est-à-dire $[A, B] = A \cdot B - B \cdot A = 0$.

Une valeur propre a_k est dite **dégénérée** d'ordre n_k si elle est de multiplicité n_k . Il y a alors un sous espace propre de dimension n_k dont la base est définie de manière arbitraire.

On appelle **ensemble complet d'opérateurs** qui commutent un ensemble d'opérateurs A, B, C, \dots commutant deux à deux et spécifiant de façon unique une base de vecteurs propres communs.

Chaque vecteur $|k\rangle$ de cette base est vecteur propre de A, B, C, \dots avec des valeurs propres a_k, b_k, c_k, \dots et deux vecteurs propres distincts diffèrent par l'une au moins des valeurs propres.

Commutateurs

Un commutateur est une forme bilinéaire telle que

$$[\lambda \cdot A_1 + \mu \cdot A_2, B] = \lambda \cdot [A_1, B] + \mu \cdot [A_2, B]$$

$$[A, \lambda \cdot B_1 + \mu \cdot B_2] = \lambda \cdot [A, B_1] + \mu \cdot [A, B_2]$$

Cette forme est antisymétrique : $[A, B] = -[B, A] = A \cdot B - B \cdot A$

Propriétés ;

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

$$[A, B_1 \cdot B_2] = [A, B_1] \cdot B_2 + B_1 \cdot [A, B_2]$$

$$[A_1 \cdot A_2, B] = A_1 \cdot [A_2, B] + [A_1, B] \cdot A_2$$

Si A et B sont hermitiques $[A, B]^* = -[A, B]$ et $[A, B] = i \cdot C$ où C est hermitique

Un opérateur opposé à son adjoint est dit **anti-hermitique**.

Dispersion, incompatibilité et inégalité de Heisenberg

On définit la **dispersion** $\Delta_v A$ d'une grandeur physique A , dans un certain état v , à l'aide de la notion probabiliste d'écart quadratique moyen :

$$(\Delta_v A)^2 = \langle A^2 \rangle_v - \langle A \rangle_v^2$$

Cette dispersion est nulle si, et seulement si, A prend une valeur bien déterminée c'est-à-dire une de ses valeurs propres. L'état v est alors l'état propre correspondant. La dispersion se calcule aussi à l'aide de l'opérateur A :

$$(\Delta_v A)^2 = \langle v|A^2|v \rangle - \langle v|A|v \rangle^2$$

On définit un opérateur recentré sur sa valeur moyenne dans l'état v par :

$$A_0 = A - \langle v|A|v \rangle \cdot I$$

On a alors ;

$$\langle v|A_0|v \rangle = 0$$

$$(\Delta_v A)^2 = \langle v|A_0^2|v \rangle$$

$$\Delta_v A = 0 \Leftrightarrow A|v \rangle = a \cdot |v \rangle$$

Soient deux grandeurs incompatibles A et B telles que $[A, B] = i \cdot C$. L'**inégalité de Heisenberg** s'écrit alors ; (on ne distinguera plus la grandeur A et son opérateur A)

$$\Delta_v A \cdot \Delta_v B \geq \frac{1}{2} \cdot |\langle C \rangle_v|$$

Symétrie et théorème de Wigner

On s'intéresse au comportement d'un système quantique lors d'une transformation s'appliquant au référentiel utilisé pour décrire ce système. Une telle transformation est appelée **symétrie** du système.

Une symétrie d'un système quantique, c'est-à-dire une transformation g laissant invariante ses lois physiques, est représentée par un opérateur unitaire $U(g)$ dans l'espace des états.

Théorème de Wigner : Toute application T de l'espace de Hilbert qui préserve le module des produits scalaires est physiquement équivalente à une application qui, soit préserve la phase, soit la renverse. Autrement dit, si $|\langle T \cdot w | T \cdot v \rangle| = |\langle w | v \rangle|$ alors on peut toujours définir une application S telle que $S \cdot v = e^{i\alpha(v)} \cdot T \cdot v$ de façon à avoir ;

1. Soit $\langle S \cdot w | S \cdot v \rangle = \langle w | v \rangle$ où S est un opérateur unitaire.
2. Soit $\langle S \cdot w | S \cdot v \rangle = \langle v | w \rangle$ où S est un opérateur anti-unitaire.

Systemes composés et produit tensoriel

On considère un système quantique M dont l'espace des états est un espace de Hilbert H et un autre système M' dont l'espace des états est H' . Si M est dans un état v de H et M' dans un état v' de H' alors le système composé $M+M'$ est par le couple des états v et v' que l'on note $v \otimes v'$. L'ensemble de ces couples est un espace des états pour le système composé, on le note $H \otimes H'$, c'est un espace de Hilbert sur lequel on définit un produit scalaire :

$$\langle w \otimes w' | v \otimes v' \rangle = \langle w | v \rangle \cdot \langle w' | v' \rangle$$

Si $B = \{u_k\}$ et $B' = \{u'_l\}$ sont des bases orthonormées respectives de H et H' alors l'ensemble des couples de ces vecteurs de base, soit $\{u_k \otimes u'_l\}$, est une base orthonormée de $H \otimes H'$ notée $B \otimes B'$. $H \otimes H'$ a pour dimension $\dim(H \otimes H') = \dim(H) \times \dim(H')$.

En écrivant v et v' dans les bases respectives de H et H' , on a :

$$v = \sum_k c_k \cdot u_k$$

$$v' = \sum_l c'_l \cdot u'_l$$

Le vecteur $V = v \otimes v'$ se projette sur $u_k \otimes u'_l$: $\langle u_k \otimes u'_l | v \otimes v' \rangle = \langle u_k | v \rangle \cdot \langle u'_l | v' \rangle = c_k \cdot c'_l$

$$\text{Ainsi } V = v \otimes v' = \sum_k \sum_l c_k \cdot c'_l \cdot u_k \otimes u'_l .$$

Mais les vecteurs de $H \otimes H'$ ne sont pas tous de la forme $v \otimes v'$, et un vecteur V de $H \otimes H'$ s'écrit de manière générale :

$$V = \sum_k \sum_l c_{kl} \cdot u_k \otimes u'_l$$

Le produit scalaire est alors tel que $\langle W | V \rangle = \sum_k \sum_l \bar{d}_{kl} \cdot c_{kl}$ où $W = \sum_k \sum_l d_{kl} \cdot u_k \otimes u'_l$.

Soient A et A' deux opérateurs respectivement de H et H' . On peut définir ainsi un opérateur de $H \otimes H'$, noté $A \otimes A'$, tel que

$$(A \otimes A') \cdot \sum_k \sum_l c_{kl} \cdot u_k \otimes u'_l = \sum_k \sum_l c_{kl} \cdot A u_k \otimes A' u'_l$$

Ainsi l'action sur un vecteur du type $v \otimes v'$ est

$$(A \otimes A') \cdot (v \otimes v') = A v \otimes A' v'$$

Remarque : tous les opérateurs de $H \otimes H'$ ne sont pas de la forme $A \otimes A'$.

II - L'évolution temporelle

L'opérateur d'évolution

On considère un système quantique **isolé**. L'état de ce système est caractérisé par un vecteur unitaire $v(t)$ de l'espace de Hilbert des états H dont une base des états propres associée à une grandeur physique A est $\{u_k(t)\}$. Le système est alors invariant par translation dans le temps c'est-à-dire que son comportement n'évolue pas au cours du temps et que la propriété A est conservée ; cette dernière conserve les mêmes valeurs propres $\{a_k\}$ au cours du temps. Cependant à deux instants différents t_1 et t_2 les vecteurs propres $u_n(t_1)$ et $u_n(t_2)$ associés à une même valeur propre a_n non dégénérée diffèrent d'un facteur de phase

$$u_n(t_2) = \exp(i \cdot \alpha_n(t_2, t_1)) \cdot u_n(t_1)$$

Les probabilités de transition des états $v(t_1)$ et $v(t_2)$ vers les états $u_n(t_1)$ et $u_n(t_2)$ respectivement sont telles que

$$|\langle u_n(t_1) | v(t_1) \rangle|^2 = |\langle u_n(t_2) | v(t_2) \rangle|^2$$

D'après le théorème de Wigner, il existe un **opérateur unitaire** $U(t_2, t_1)$ reliant $v(t_1)$ et $v(t_2)$, c'est l'**opérateur d'évolution** de t_1 à t_2 . L'opérateur $U(t_2, t_1)$ est diagonal dans la base $\{u_k(t_1)\}$ et ses valeurs propres sont les facteurs de phase $\exp(i \cdot \alpha_n(t_1, t_2))$.

On a ;

$$\langle v(t_2) | u_n(t_2) \rangle = \langle v(t_1) | u_n(t_1) \rangle$$

$$\langle u_n(t_1) | v(t_2) \rangle = \exp(i \cdot \alpha_n(t_1, t_2)) \cdot \langle u_n(t_1) | v(t_1) \rangle$$

$$u_n(t_2) = U(t_2, t_1) \cdot u_n(t_1)$$

De plus ;

$$U(t, t) = I$$

$$U(t_1, t_2) = U^{-1}(t_2, t_1)$$

$$U(t_1, t_2) = U(t_1 + \tau, t_2 + \tau)$$

$$U(t, t + \Delta\tau) = U(\Delta\tau)$$

$$U(t_3, t_2) \cdot U(t_2, t_1) = U(t_3, t_1)$$

On peut noter $U(t_2, t_1) = U(t_2 - t_1) = U(t)$.

« t » sera donc un intervalle de temps et non un instant.

Théorème de Stone-Naimark-Ambrose-Godement (S.N.A.G)

La famille des opérateurs d'évolution $U(t)$ est entièrement caractérisée par un opérateur hermitique Ω indépendant du temps appelé **générateur infinitésimal** d'évolution et tel que

$$U(t) = \exp(-i \cdot \Omega \cdot t)$$

Pour un petit intervalle de temps δt , l'opérateur d'évolution s'écrit au premier ordre

$$U(\delta t) = I - i \cdot \Omega \cdot \delta t + O(\delta t^2)$$

L'opérateur d'énergie ou hamiltonien

L'énergie d'un système gouverne son évolution temporelle. L'**opérateur énergie** H ou **hamiltonien** est identique à l'opérateur Ω à un facteur \hbar près, c'est-à-dire

$$H = \hbar \cdot \Omega$$

Ainsi l'opérateur d'évolution $U(t)$ est relié à H par la relation ; $U(t) = \exp(-i \cdot H \cdot t / \hbar)$

Les états propres du hamiltonien sont des **états stationnaires**, autrement dit ils restent colinéaires à eux-mêmes au cours du temps en ne différant que d'un facteur de phase dépendant du temps. Si $u_n(t_1)$ est vecteur propre du hamiltonien à l'instant t_1 alors $u_n(t_2)$ tel que $u_n(t_2) = \exp(-i \cdot E_n \cdot (t_2 - t_1) / \hbar) \cdot u_n(t_1)$, où E_n est la valeur propre associée à u_n , est vecteur propre à l'instant t_2 . Ils représentent donc le même état propre.

Un vecteur d'état $v(t)$ du système considéré vérifie l'équation différentielle d'évolution ou **équation de Schrödinger abstraite** qui est

$$i \cdot \hbar \cdot \frac{dv}{dt} = H \cdot v(t)$$

Si un système quantique S est composé de deux sous-systèmes indépendants S_1 et S_2 d'hamiltoniens H_1 et H_2 respectivement, alors l'hamiltonien H du système total S sera

$$H = H_1 + H_2$$

Si les sous-systèmes interagissent, il faut rajouter un terme supplémentaire V appelé **hamiltonien d'interaction** tel que

$$H = H_1 + H_2 + V$$

Remarque ; pour alléger les notations, on prendra dans la suite $\hbar = 1$ en indiquant entre parenthèse qu'il faut rajouter \hbar dans les formules considérées.

Dépendance en temps des amplitudes quantiques

On considère un système quantique qui change d'état au cours du temps.

Soit $u_E(t)$ un état propre de l'énergie du système associé à la valeur propre E et v un état de référence quelconque du système. La stationnarité de l'état propre $u_E(t)$ implique que $\left| \langle v | u_E(t) \rangle \right|^2$, c'est-à-dire la probabilité de transition de l'état $u_E(t)$ vers l'état v , est indépendante de t quelque soit v .

On montre que $\langle v | u_E(t) \rangle = C \cdot e^{-iEt}$ où C est un facteur de phase fixe ($C \in \mathbb{C}$).

Ainsi

$$\begin{aligned} \langle v | u_E(t_2) \rangle &= e^{-iE(t_2-t_1)} \cdot \langle v | u_E(t_1) \rangle \\ \langle v | u_E(t) \rangle &= e^{-iEt} \cdot \langle v | u_E(0) \rangle \end{aligned} \quad (\hbar)$$

Soit un état $w(t)$ non stationnaire. L'amplitude de transition de l'état $w(t)$ vers l'état de référence v peut s'écrire

$$\langle v | w(t) \rangle = \sum_E \langle v | u_E(t) \rangle \cdot \langle u_E(t) | w(t) \rangle$$

$$\text{Or } \langle u_E(t) | w(t) \rangle = \langle u_E(0) | w(0) \rangle$$

Donc

$$\langle v | w(t) \rangle = \sum_E e^{-iEt} \cdot \langle v | u_E(0) \rangle \cdot \langle u_E(0) | w(0) \rangle \quad (\hbar)$$

En particulier, si $v = w(0)$ alors

$$\langle w(0) | w(t) \rangle = \sum_E e^{-iEt} \cdot \left| \langle u_E(0) | w(0) \rangle \right|^2 \quad (\hbar)$$

La probabilité de transition de l'état $w(t)$ vers l'état $w(0)$ s'écrit ainsi

$$P(w(0) \leftarrow w(t)) = \left| \langle w(0) | w(t) \rangle \right|^2 = \sum_E P_E^2 + 2 \cdot \sum_E \sum_{E' \neq E} P_E \cdot P_{E'} \cdot \cos(E - E')t \quad (\hbar)$$

Les fréquences $\nu = (E - E') / (2\pi \cdot \hbar)$ sont appelées **fréquences de battements**.

Evolution des propriétés physiques

On s'intéresse à une propriété physique A , identifiée à un opérateur hermitique A , d'un système quantique dont l'état $v(t)$ évolue au cours du temps. L'opérateur A , qu'on suppose ne pas dépendre explicitement du temps, a pour valeurs propres l'ensemble $\{a_k\}$ associées aux états propres $\{|a_k\rangle\}$.

Lors d'une mesure de A , la probabilité de transition de l'état $v(t)$ vers l'état propre $|a_n\rangle$, c'est-à-dire la probabilité pour que A prennent la valeur a_n est ;

$$P_n(t) = \left| \langle a_n | v(t) \rangle \right|^2$$

La valeur moyenne de A dans l'état $v(t)$ est définie par ;

$$\langle A \rangle_{v(t)} = \sum_k a_k \cdot P_k(t) = \langle v(t) | A | v(t) \rangle$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle_{v(t)} &= \langle dv/dt | A | v \rangle + \langle v | A | dv/dt \rangle \\ &= -i \cdot \langle v | H \cdot A | v \rangle + i \cdot \langle v | A \cdot H | v \rangle \quad (\hbar) \\ &= i \cdot \langle [A, H] \rangle \end{aligned}$$

On définit l'opérateur **taux d'évolution de A** ou vitesse de A par ;

$$\dot{A} = i \cdot [A, H] \quad (\hbar)$$

Avec $\langle \dot{A} \rangle = \frac{d}{dt} \langle A \rangle$.

Remarque : les deux dernières relations sont encore valables si A dépend du temps.

La condition nécessaire et suffisante pour qu'une propriété physique A soit conservée est que sa valeur moyenne $\langle A \rangle_{v(t)}$ soit constante et donc que son taux d'évolution soit nul.

Conclusion ; A conservée $\Leftrightarrow [A, H] = 0$

Les probabilités de transition sont également invariantes au cours de l'évolution,

$$P_n(t) = P_n(0) = \text{cte}$$

L'inégalité de Heisenberg temporelle s'écrit

$$\Delta_v E \cdot \tau_v(A) \geq \frac{1}{2} \quad (\hbar)$$

où $\Delta_v E$ est la dispersion du hamiltonien H et $\tau_v(A) = \frac{\Delta_v A}{|\langle A \rangle_v|}$.

Les systèmes non-isolés

Les systèmes non-isolés c'est-à-dire en interaction avec le milieu extérieur ont un hamiltonien qui dépend du temps. L'équation de Schrödinger s'écrit alors

$$i \cdot \frac{dv}{dt} = H(t) \cdot v(t) \quad (\hbar)$$

Les états propres et les valeurs propres de l'hamiltonien dépendent non-trivialement du temps. Les valeurs propres ne peuvent plus être identifiées aux valeurs propres de l'énergie. L'énergie n'est plus une grandeur conservée. On a la relation

$$v(t) = v(0) - i \cdot \int_0^t H(t') \cdot v(t') \cdot dt' \quad (\hbar)$$

En itérant l'équation précédente, on peut exprimer l'opérateur d'évolution U(t, 0) entre v(t) et v(0) ;

$$U(t, 0) = I - i \cdot \int_0^t H(t') \cdot dt' + \dots + (-i)^n \cdot \int_0^t \int_0^{t'} \dots \int_0^{t^{(n-1)}} H(t') \cdot H(t'') \dots H(t^{(n)}) \cdot dt' \cdot dt'' \dots dt^{(n)} + \dots \quad (\hbar)$$

avec $0 \leq t^{(n)} \leq \dots \leq t' \leq t$.

III - Le comportement spatial

Position et quantité de mouvement

Les translations d'espace et la quantité de mouvement

On suppose que l'espace a une seule dimension et on l'identifie à la droite réelle. Cet espace est invariant par translation. Les translations forment un groupe qui est isomorphe au groupe additif des réels \mathbb{R} . D'après le théorème de Wigner, à toute translation T_a correspond un opérateur unitaire $U(a)$ qui représente l'action de la translation T_a dans l'espace des états du système H . Ainsi un état v de H est, après la translation T_a , représenté par un vecteur $v^{(a)}$ de H tel que $T_a : v^{(a)} = U(a) \cdot v$.

A la représentation unitaire du groupe des translations d'espace, on associe un générateur infinitésimal K , opérateur hermitique dans H , tel que

$$U(a) = \exp(i \cdot K \cdot a)$$

Les états propres associés à la grandeur physique représentée par l'opérateur hermitique K sont invariants par translation : si u_k est un vecteur propre de valeur propre k alors

$$u_k^{(a)} = \exp(i \cdot K \cdot t) \cdot u_k = e^{i \cdot k \cdot a} \cdot u_k$$

On dit que ces états sont totalement délocalisés. (Ils représentent le même état physique)

L'opérateur K s'identifie, au facteur \hbar près, à l'opérateur quantité de mouvement P :

$$P = \hbar \cdot K$$

Position et relation de commutation canonique

Un **état localisé** en un point précis, correspondant à une valeur propre x de la position, est un état propre u_x de la grandeur physique position représentée par un opérateur hermitique X :

$$X \cdot u_x = x \cdot u_x$$

Toute translation T_a doit vérifier la condition ; $T_a : u_x^{(a)} = U(a) \cdot u_x = u_{x-a}$

L'opérateur de position X , sous l'action de l'opérateur unitaire de translation $U(a)$, se transforme comme la position classique ;

$$U^{-1}(a) \cdot X \cdot U(a) = X - a \cdot I$$

Enfin, la position moyenne dans un état v quelconque se transforme par translation comme la position moyenne classique ;

$$\langle X \rangle_{v^{(a)}} = \langle X \rangle_v - a$$

Comme $U(a) = \exp(i \cdot P \cdot a)$ (à \hbar près), on a :

$$X + i \cdot a \cdot [X, P] + \frac{(-i \cdot a)^2}{2} \cdot [[X, P], P] + \dots + \frac{(-i \cdot a)^n}{n!} \cdot [[[X, P], \dots, P]] + \dots = X - a \cdot I \quad (\hbar)$$

Au premier ordre en a , il vient ;

$$[X, P] = i \cdot I$$

Et le second ordre (comme les ordres suivants) ;

$$[[X, P], P] = 0$$

Deux opérateurs A et B liés par une **relation de commutation canonique** $[A, B] = i \cdot I$ sont dits **conjugués**, ils constituent une **paire canonique**.

La non-commutativité de X et de P et leur incompatibilité font qu'aucun état propre de la position (état localisé) ne peut être en même temps état propre de la quantité de mouvement.

Tout opérateur qui commute à la fois avec X et avec P est un multiple de l'identité :

$$\left. \begin{array}{l} [A, X] = 0 \\ [A, P] = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow A = \alpha \cdot I$$

Etude de X et P

Le spectre de chacun des opérateurs X et P est continu et s'étend sur la droite entière.

En effet : $\forall a \in \mathbb{R}$

$$\left. \begin{aligned} X \cdot |x\rangle &= x \cdot |x\rangle \\ |x^{(a)}\rangle &= U(a) \cdot |x\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow X \cdot |x^{(a)}\rangle = U(a) \cdot (X - a \cdot I) \cdot |x\rangle = (x - a) |x^{(a)}\rangle$$

Le caractère continu du spectre de X entraîne l'existence d'une famille continue d'états propres $\{|x\rangle\}$. Cette famille ne peut former une base de l'espace de Hilbert puisque une base, même si l'espace est de dimension infinie, est discrète et dénombrable.

La notion de base se généralise à celle de **base continue** dont les vecteurs sont orthogonaux mais non normalisables :

La relation de complétude $I = \sum_{n=0}^{+\infty} |x_n\rangle \langle x_n|$ devient $I = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| \cdot dx$.

Un vecteur quelconque s'écrira alors $|v\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x|v\rangle \cdot dx$.

Ainsi, si $|x'\rangle$ est un vecteur propre ; $\langle x'|v\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \langle x|v\rangle \cdot dx$.

$\langle x'|x\rangle$ est égale à la distribution de Dirac, elle fournit la valeur de la fonction $\langle x|v\rangle$ au point x' .

On a :

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x'|x\rangle \cdot dx = 1$$

$$\langle x|x\rangle = \delta(0) = +\infty$$

Ces vecteurs généralisés ne sont pas des vecteurs de l'espace de Hilbert.

Les mêmes considérations peuvent être faites en remplaçant x par p.

Les fonctions d'onde

Dans la base généralisée $\{|x\rangle\}$, un vecteur d'état quelconque v est caractérisé par l'ensemble de ses composantes généralisées $\langle x|v\rangle$. On note $\varphi_v(x) = \langle x|v\rangle$, la fonction de x liée à la probabilité de localisation au point x de l'état v ; c'est la **fonction d'onde de l'état v**.

La **densité de probabilité de localisation** au point x de l'état v est ;

$$\rho(x) = |\varphi_v(x)|^2$$

On a ; $\langle v'|v\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\varphi_{v'}(x)} \cdot \varphi_v(x) \cdot dx$

Ainsi les fonctions d'onde sont des fonctions de carré sommable normalisées ;

$$\langle v|v\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_v(x)|^2 \cdot dx = 1$$

La valeur moyenne d'une grandeur f(X) dans l'état v s'écrit ;

$$\langle f(X) \rangle_v = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot \rho(x) \cdot dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot |\varphi_v(x)|^2 \cdot dx$$

La dispersion en position du quanton dans l'état v est ;

$$(\Delta_v X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 = \int x^2 \cdot |\varphi_v(x)|^2 \cdot dx - \left(\int x \cdot |\varphi_v(x)|^2 \cdot dx \right)^2$$

Les mêmes considérations peuvent être faites en remplaçant x par p .

Réalisation de X et de P

Chaque état étant représenté par sa fonction d'onde, l'espace de Hilbert abstrait H est réalisé comme l'espace des fonctions de carré sommable de la variable position x . On note H_x cette réalisation en x de H . De même, la réalisation en p de H sera notée H_p . Les espaces des états obtenus sont de dimension infinie.

On considère tout d'abord la réalisation H_x . On a :

$$\langle x | X | v \rangle = x \cdot \langle x | v \rangle \Leftrightarrow (X \cdot \varphi_v)(x) = x \cdot \varphi_v(x)$$

Ainsi, l'action de l'opérateur X sur les fonctions d'onde en x est la multiplication par la variable x ; on note ;

$$H_x : X = x \times$$

Par ailleurs,

$$U(a) \cdot \varphi_v(x) = \varphi_v(x+a) \Rightarrow [I + i \cdot a \cdot P + O(a^2)] \varphi_v(x) = \varphi_v(x) + a \cdot \frac{d\varphi_v}{dx} + O(a^2) \quad (\hbar)$$

Le premier ordre donne ; $P\varphi_v(x) = -i \cdot \frac{d\varphi_v}{dx} \quad (\hbar)$

L'opérateur P dans H_x agit par dérivation au coefficient $-i$ près ;

$$H_x : P = -i \cdot \frac{d}{dx} \quad (\hbar)$$

Dans H_x , les opérateurs X et P sont hermitiques et vérifient la relation de commutation canonique ; $[X, P] \varphi = i \cdot \varphi$

De même dans H_p , on aura :

$$H_p : P = p$$

$$H_p : X = i \cdot \frac{d}{dp} \quad (\hbar)$$

La transformation de Fourier

La transformation de Fourier permet d'établir le lien entre H_x et H_p en exprimant la fonction d'onde en p d'un état v , $\hat{\varphi}_v(p) = \langle p | v \rangle$, en termes de sa fonction d'onde en x , $\varphi_v(x) = \langle x | v \rangle$.

On peut écrire ;

$$\langle p | v \rangle = \int \langle p | x \rangle \langle x | v \rangle \cdot dx = \int \hat{\varphi}_x(p) \cdot \langle x | v \rangle \cdot dx$$

$\hat{\varphi}_x(p) \in H_p$, donc

$$\langle p | X | x \rangle = x \cdot \langle p | x \rangle = i \cdot \frac{d}{dp} \langle p | x \rangle \quad (\hbar)$$

$$\Leftrightarrow i \cdot \frac{d\hat{\varphi}_x}{dp} = x \cdot \hat{\varphi}_x$$

On en déduit ;

$$\hat{\varphi}_x(p) = A \cdot e^{-i \cdot p \cdot x}$$

$$\varphi_p(x) = \overline{A} \cdot e^{i \cdot p \cdot x} \quad (\hbar)$$

où la normalisation permet de choisir A comme une constante réelle égale à $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$.

Ainsi,

$$\hat{\varphi}_v(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int e^{-i \cdot p \cdot x} \cdot \varphi_v(x) \cdot dx \quad (\hbar)$$

$$\varphi_v(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int e^{i \cdot p \cdot x} \cdot \hat{\varphi}_v(p) \cdot dp$$

En notant F la transformation de Fourier, ces relations deviennent ;

$$\hat{\varphi}_v = F \cdot \varphi_v$$

$$\varphi_v = F^{-1} \cdot \hat{\varphi}_v$$

Application : Calcul de la valeur moyenne de l'opérateur P² ;

$$\langle P^2 \rangle_v = \int \overline{\hat{\varphi}(p)} \cdot P^2 \cdot \varphi(p) \cdot dp = \int p^2 \cdot |\hat{\varphi}(p)|^2 \cdot dp \quad (\hbar)$$

ou encore

$$\langle P^2 \rangle_v = -\int \overline{\varphi(x)} \cdot \varphi''(x) \cdot dx = \int |\varphi'(x)|^2 \cdot dx = -\int \overline{\varphi''(x)} \cdot \varphi(x) \cdot dx \quad (\hbar)$$

Généralisation

Toutes les réalisations de la relation de commutation canonique sont unitairement équivalentes. Deux paires d'opérateurs conjugués (X₁, P₁) et (X₂, P₂) sont liées par un opérateur unitaire U :

$$X_2 = U^{-1} \cdot X_1 \cdot U$$

$$P_2 = U^{-1} \cdot P_1 \cdot U$$

Canonicité de X et de P

Tout opérateur A dans l'espace de Hilbert H peut s'exprimer en terme des deux opérateurs X et P. On montre que A peut s'écrire ;

$$A = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \cdot f_n(X) \cdot (i \cdot P)^n$$

où $f_n(x) = \int a(x, x+y) \cdot y^n \cdot dy$ et $a(x, x') = \langle x | A | x' \rangle$

Conjugaison et inégalité de Heisenberg

Propriétés de conjugaison en x et p

La transformation de Fourier F transforme la multiplication par la variable en dérivation par rapport à la variable conjuguée. Ainsi :

$$F(x \cdot \varphi) = i \cdot \frac{d\hat{\varphi}}{dp} \quad (\hbar)$$

$$F(x^n \cdot \varphi) = i^n \cdot \frac{d^n \hat{\varphi}}{dp^n}$$

Si on considère un changement d'échelle des longueurs sur la fonction d'onde c'est-à-dire une dilatation telle que $x \rightarrow \lambda \cdot x$ où $\lambda > 0$ alors la fonction d'onde, normée à l'unité, doit être multipliée par le facteur $\sqrt{\lambda}$. Donc

$$\varphi_\lambda(x) = \sqrt{\lambda} \cdot \varphi(\lambda \cdot x) \Rightarrow \hat{\varphi}_\lambda(p) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \cdot \hat{\varphi}\left(\frac{p}{\lambda}\right)$$

Inégalité de Heisenberg

On considère un quanton de fonction d'onde φ et de densités de probabilité en x , $\rho(x) = |\varphi(x)|^2$ et en p , $\sigma(p) = |\hat{\varphi}(p)|^2$.

Ces densités de probabilité permettent de calculer les dispersions quadratiques ;

$$\begin{cases} \Delta X = (\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2)^{1/2} \\ \Delta P = (\langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2)^{1/2} \end{cases}$$

La relation de commutation canonique entraîne alors l'inégalité de Heisenberg élémentaire

$$\Delta X \cdot \Delta P > \frac{1}{2} \quad (\hbar)$$

Cette inégalité montre que plus la répartition de probabilité en x est étroite, plus la distribution en p doit être large.

On peut définir un coefficient de corrélation $r(X, P)$ entre X et P tel que

$$r(X, P) = \frac{\left\langle \frac{1}{2} \cdot \{X, P\} \right\rangle - \langle X \rangle \langle P \rangle}{\Delta X \cdot \Delta P} \leq 1 - \frac{\hbar^2}{2\Delta X \cdot \Delta P}.$$

IV - La dynamique du quanton

L'invariance galiléenne

La transformation de Galilée instantanée décrit la relation entre les descriptions du système étudié dans deux référentiels en mouvement uniforme l'un par rapport à l'autre coïncidant spatialement à l'instant considéré. Ainsi, une telle transformation de vitesse \mathbf{v} ($\ll c$) est définie par les relations ;

$$\begin{aligned} x' &= x \\ \dot{x}' &= \dot{x} - \mathbf{v} \\ p' &= p - m \cdot \mathbf{v} \end{aligned}$$

où m est la masse du quanton.

Ces transformations forment un groupe, additif par rapport au paramètre \mathbf{v} , appelé **groupe de Galilée instantané**.

Le générateur galiléen

Le théorème de Wigner permet d'affirmer que le groupe des transformations de Galilée est représenté par des opérateurs unitaires agissant dans l'espace de Hilbert des états. A chaque transformation de Galilée de vitesse \mathbf{v} est ainsi associé un opérateur unitaire $U(\mathbf{v})$ tel que ;

$$U(\mathbf{v}) \cdot U(\mathbf{v}') = U(\mathbf{v} + \mathbf{v}')$$

Il existe un générateur infinitésimal du groupe de Galilée, c'est l'opérateur hermitien noté G tel que ;

$$U(\mathbf{v}) = \exp(-i \cdot G \cdot \mathbf{v})$$

Les transformations de Galilée agissent sur les propriétés physiques d'un quanton de façon cohérente avec la structure de la mécanique classique.

Les valeurs moyennes de X et P dans un état ν quelconque se transforment comme les grandeurs classiques homologues :

$$\begin{aligned} \langle X \rangle_{\nu'} &= \langle X \rangle_{\nu} \\ \langle P \rangle_{\nu'} &= \langle P \rangle_{\nu} - m \cdot \mathbf{v} \end{aligned}$$

De plus, $v' = U(\mathbf{v}) \cdot v$. On a alors les formules de transformation galiléennes pour les opérateurs X et P :

$$U^{-1}(\mathbf{v}) \cdot X \cdot U(\mathbf{v}) = X$$

$$U^{-1}(\mathbf{v}) \cdot P \cdot U(\mathbf{v}) = P - m \cdot \mathbf{v} \cdot I$$

Le développement de l'opérateur unitaire $U(\delta\mathbf{v})$ permet de déduire des relations précédentes les relations de commutation :

$$\begin{aligned} [G, X] &= 0 \\ [G, P] &= i \cdot m \cdot I \end{aligned}$$

Comme tout opérateur G s'exprime à l'aide des opérateurs canoniques X et P , mais G ne commutant qu'avec X , il ne dépend que de X :

$$G = m \cdot X \quad (\hbar)$$

Ainsi, $U(\mathbf{v}) = \exp(-i \cdot m \cdot \mathbf{v} \cdot X)$.

$$(\hbar)$$

Hamiltonien et potentiels

L'opérateur vitesse

Il est défini comme étant le taux d'évolution de la position X et noté \dot{X} :

$$\dot{X} = i \cdot [H, X]$$

On a par ailleurs ;

$$\langle \dot{X} \rangle_{v'} = \langle \dot{X} \rangle_v - \mathbf{v}$$

$$U^{-1}(\mathbf{v}) \cdot \dot{X} \cdot U(\mathbf{v}) = \dot{X} - \mathbf{v} \cdot I \quad (\hbar)$$

$$[G, \dot{X}] = i \cdot I$$

Expression canonique du hamiltonien

Sachant que $G = m \cdot X$, on a ;

$$[m \cdot \dot{X}, X] = -i \cdot I$$

$$\Leftrightarrow [(1/2)m \cdot \dot{X}^2, X] = -i \cdot \dot{X}$$

$$\Rightarrow [H - (1/2)m \cdot \dot{X}^2, X] = 0$$

Il en résulte que l'opérateur $H - (1/2)m \cdot \dot{X}^2$, commutant avec X , ne peut dépendre de la quantité de mouvement P , et est donné par une certaine fonction $V(X)$ de la position seule :

$$H = (1/2)m \cdot \dot{X}^2 + V(X)$$

Pour exprimer H en fonction de X et P , il faut exprimer \dot{X} en ces mêmes termes :

$$[P - m \cdot \dot{X}, X] = 0$$

$$\Rightarrow P = m \cdot \dot{X} + A(x)$$

où $A(x)$ joue par rapport à P le même rôle que V par rapport à H .

Ainsi,

$$H = (1/2m) \cdot (P - A(X))^2 + V(X)$$

$$\Leftrightarrow H = (1/2m) \cdot (P^2 - A(X) \cdot P - P \cdot A(X) + A^2(X)) + V(X)$$

Le quanton libre

Le hamiltonien et les états stationnaires

Un quanton est **libre** si son comportement ne dépend pas de sa localisation, autrement dit, si les translations spatio-temporelles n'affectent pas sa dynamique. Le hamiltonien doit être laissé invariant par les opérateurs unitaires de translations :

$$U^{-1}(a) \cdot H \cdot U(a) = H$$

avec $U(a) = \exp(i \cdot a \cdot P) \quad (\hbar)$

On en déduit que $[H, P] = 0$, donc (A étant superflu à une dimension)

$$H = (1/2m) \cdot P^2 + V_0$$

où V_0 est une constante arbitraire.

Comme H commute avec P et \dot{X} , l'opérateur accélération \ddot{X} défini par :

$$\ddot{X} = i \cdot [H, \dot{X}]$$

est nul, ce qui traduit en termes quantiques l'uniformité du mouvement.

De plus, H et P commutent, ils ont une base commune d'états propres. Les états propres de P, à l'instant $t = 0$ par exemple, notés $|p\rangle$ et définis par ;

$$P \cdot |p\rangle = p \cdot |p\rangle$$

sont les états propres de H tels que ;

$$H \cdot |p\rangle = E_p \cdot |p\rangle$$

où $E_p = p^2 / 2m + V_0$

Caractère projectif de la représentation

$$[H, P] = 0$$

↔ 1) Conservation de la quantité de mouvement ou invariance par translation de temps de P ; un état propre de P est stationnaire.

2) Invariance par translation d'espace de H ou indifférence de l'évolution du quanton libre à l'égard de la position spatiale.

$$[G, H] = i \cdot P$$

↔ La non-commutation des transformations de Galilée et des translations dans le temps.

$$[G, P] = i \cdot m \cdot I$$

exprime 1) La propriété de transformation par translation G.

2) La propriété de transformation galiléenne de la quantité de mouvement.

Les générateurs infinitésimaux de la représentation du groupe de Galilée ne commutent pas :

$$U(-\mathbf{v}) \cdot U(-\mathbf{a}) \cdot U(\mathbf{v}) \cdot U(\mathbf{a}) = \exp(i \cdot m \cdot \mathbf{a} \cdot \mathbf{v}) \cdot I$$

On obtient l'opérateur identité à une phase près (ce qui ne change pas l'état physique).

Ainsi la représentation du groupe de Galilée utilisée pour décrire un quanton libre est une représentation à une phase près appelée **représentation projective**.

Pour une représentation projective en général les relations de commutation deviennent ;

$$[H, P] = i \cdot q \cdot I$$

$$[G, H] = i \cdot P + i \cdot n \cdot I$$

$$[G, P] = i \cdot m \cdot I$$

Les générateurs n'étant définis qu'à l'addition d'un opérateur scalaire multiple de l'identité près, on retrouve les relations de commutation précédentes.

La règle de supersélection sur la masse galiléenne

En théorie quantique galiléenne, deux états de masse différente d'un même système physique doivent toujours être considérés comme orthogonaux. Ainsi, il existe des grandeurs physiques dont les états propres ne peuvent être superposés c'est-à-dire que tout état physique est nécessairement état propre de ces grandeurs. On dit de ces grandeurs qu'elles obéissent à une **règle de supersélection**.

Le quanton en interaction avec un champ extérieur

Les équations de Schrödinger

Dans H_x , X devient un opérateur de multiplication et P un opérateur de dérivation :

$$X = x$$

$$P = -i \cdot \frac{\partial}{\partial x} \quad (\hbar)$$

L'opérateur H est alors un opérateur différentiel du second ordre :

$$H = -(\hbar^2/2m) \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t)$$

où $V(x, t)$ est l'opérateur de multiplication par la fonction $V(x, t)$.

La fonction d'onde $\phi(x, t)$ obéit alors à l'**équation de Schrödinger dépendante du temps** :

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

Si le *potentiel est indépendant du temps*, en posant $\phi(x, t) = e^{-i(E/\hbar)t} \cdot \phi(x)$, la fonction d'onde $\phi(x)$ obéit à l'**équation de Schrödinger indépendante du temps** :

$$-(\hbar^2/2m) \cdot \frac{\partial^2 \phi(x)}{\partial x^2} + V(x) \cdot \phi(x) = E \cdot \phi(x)$$

$\phi(x, t)$ est appelée **solution stationnaire** de l'équation de Schrödinger.

La diagonalisation du hamiltonien H est ramenée alors à la résolution de l'équation de Schrödinger

indépendante du temps sous la condition $\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x)|^2 \cdot dx = 1$.

Les conditions de continuité

On considère un potentiel $V(x)$ continu par morceaux et borné. Il peut présenter des discontinuités localisées pourvu qu'elles soient finies. On admet que la fonction d'onde reste bornée pour des raisons physiques. En intégrant l'équation de Schrödinger indépendante du temps au voisinage d'un point quelconque x_0 sur l'intervalle $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$, on déduit que :

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\phi'(x_0 + \epsilon) - \phi'(x_0 - \epsilon)] = 0$$

La dérivée de la fonction d'onde est donc continue même aux points de discontinuités du potentiel si celui-ci reste borné. La fonction d'onde est par conséquent elle aussi continue.

Etude qualitative des états stationnaires

On considère un puit de potentiel simple c'est-à-dire un potentiel $V(x)$ s'annulant à l'infini et négatif dans la région physique intéressante. Un tel potentiel correspond classiquement à un champ de forces attractives. L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut s'écrire sous la forme ;

$$\phi'' = 2m \cdot (V - E) \cdot \phi \quad (\hbar)$$

On distingue :

(1) **Les états liés** ; ce sont les états d'énergie $E < 0$. On considère alors trois régions déterminées par les points x_1 et x_2 tels que $V(x_1) = V(x_2) = E$.

Ces points sont les points de rebroussement classiques, limites du mouvement oscillatoire d'une particule classique d'énergie E dans un puit de potentiel V . Pour $x < x_1$ et $x > x_2$, $E < V(x)$ implique que φ'' a le même signe que φ . Le potentiel V devenant négligeable pour les grandes valeurs de x (en valeur absolue), on peut poser $E = -K^2/2m$ et l'équation de Schrödinger devient ;

$$\varphi'' = K^2 \cdot \varphi$$

La solution générale est alors une combinaison linéaire de fonctions du type $\exp(\pm K \cdot x)$.

Pour $x_1 < x < x_2$, $E > V(x)$ implique que φ'' et φ sont de signes opposés et φ aura alors un comportement oscillatoire. On peut supposer que le potentiel $V(x)$ reste à peu près constant dans

cette région et on pose $V(x) = V_0$ et $E - V_0 = \frac{k^2}{2m}$. L'équation devient ainsi ;

$$\varphi'' = -k^2 \cdot \varphi$$

La solution est de type sinusoïdale en $\sin(k \cdot x + \alpha)$.

Après avoir raccorder les solutions en x_1 et en x_2 , on doit imposer la condition de normalisation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 \cdot dx = 1.$$

Ce n'est que pour certaines valeurs bien déterminées de l'énergie que la fonction φ pourra coïncider pour $x > x_2$ avec une solution de type exponentiellement décroissante à l'infini et être donc sommable. Le spectre d'énergie des états liés est donc discret.

(2) **Les états de diffusion** ; ce sont les états d'énergie $E > 0$. La fonction d'onde sera de type oscillatoire sur tout l'axe réel et elle ne peut être normalisée. Les quantons proviennent d'une source à l'infini qui est insensible à l'action du potentiel et qui peut conférer aux quantons n'importe quelle énergie à partir de la valeur à l'infini du potentiel prise comme zéro d'énergie. Le spectre d'énergie pour les états capables de propagation à l'infini consiste en la demi-droite $E > 0$. Le spectre des états de diffusion est continu. Les quantons sont considérés comme asymptotiquement libre à l'infini et la fonction d'onde d'un quanton prend les formes asymptotiques suivantes ;

$$\begin{cases} \varphi(x) = a_+ \cdot e^{i \cdot k \cdot x} + a_- \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} & \text{pour } x \rightarrow -\infty \\ \varphi(x) = b_+ \cdot e^{i \cdot k \cdot x} + b_- \cdot e^{-i \cdot k \cdot x} & \text{pour } x \rightarrow +\infty \end{cases}$$

C'est en résolvant l'équation de Schrödinger et en identifiant les solutions aux formes asymptotiques qu'on détermine les relations qui lient les coefficients (a_+ , a_- , b_+ , b_-). Les coefficients a_+ et b_- correspondent aux amplitudes entrantes c'est-à-dire se propageant depuis l'infini et les coefficients a_- et b_+ correspondent aux amplitudes sortantes. On note S la **matrice de diffusion** telle que ;

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ a_- \end{pmatrix} = S \cdot \begin{pmatrix} a_+ \\ b_- \end{pmatrix}$$

S est unitaire et peut s'exprimer en termes des amplitudes de probabilité de transmission et de réflexion notées t et r . Ces dernières sont définies dans la situation où seule une source de quanton est présente c'est-à-dire soit $b_- = 0$, soit $b_+ = 0$;

$$t = \frac{b_+}{a_+} \quad r = \frac{a_-}{a_+} \quad \text{pour } b_- = 0$$

$$t = \frac{b_-}{a_-} \quad r = \frac{a_+}{a_-} \quad \text{pour } b_+ = 0$$

De plus, $|t|^2 + |r|^2 = 1$.

Ainsi,

$$S = \begin{pmatrix} t & -\bar{r} \cdot \frac{t}{t} \\ r & t \end{pmatrix}$$

On définit également la **matrice de transfert** M telle que ;

$$\begin{pmatrix} b_+ \\ b_- \end{pmatrix} = M \cdot \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$$

et

$$M = \begin{pmatrix} \bar{t}^{-1} & -\bar{r} \cdot \bar{t}^{-1} \\ -r \cdot t^{-1} & t^{-1} \end{pmatrix}$$

Cette matrice n'est pas unitaire mais unimodulaire ($\det(M) = 1$).

Etude de différents potentiels

Le puits plat infini unidimensionnel

On considère un potentiel $V(x)$ nul dans l'intervalle $[0, a]$ et infiniment grand en dehors de cet intervalle. Pour déterminer la fonction d'onde d'un état quelconque d'un quanton à l'intérieur du puits, il faut d'abord calculer les fonctions d'onde des états stationnaires.

Dans le puits, le potentiel étant nul, la relation $E = p^2/2m$ reste vraie et le spectre en quantité de mouvement d'un état stationnaire d'énergie E comprend deux valeurs ; $p_E = (2m \cdot E)^{1/2}$ et $-p_E$. La fonction d'onde est de la forme :

$$\varphi_E(x) = a_+ \cdot e^{i p_E \cdot x} + a_- \cdot e^{-i p_E \cdot x} \quad (\hbar)$$

A l'extérieur du puits, $\varphi_E(x) = 0$.

La continuité de la fonction d'onde implique que $\varphi_E(x)$ doit s'annuler en $x = 0$ et $x = a$, donc :

$$\begin{cases} \varphi_E(0) = 0 \\ \varphi_E(a) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_+ + a_- = 0 \\ \varphi_E(x) = 2i \cdot a_+ \cdot \sin(p_E \cdot x) \\ \sin(p_E \cdot a) = 0 \end{cases} \quad (\hbar)$$

On fixe ainsi pour p_E un ensemble discret de valeurs possibles :

$$p_E = n \cdot \frac{\pi}{a} \quad \text{où } n \in \mathbb{N}^* \quad (\hbar)$$

De même l'énergie a un spectre discret dont les valeurs propres sont telles que :

$$E_n = n^2 \cdot \frac{\pi^2}{2m \cdot a^2} \quad (\hbar)$$

Le niveau fondamental étant $E_1 = \frac{\pi^2 \cdot \hbar^2}{2m \cdot a^2}$.

Les fonctions d'ondes indépendantes du temps des états stationnaires s'écrivent :

$$\varphi_n(x) = \sqrt{2/a} \cdot \sin(n \cdot \pi \cdot \frac{x}{a}) \quad \text{où } n \in \mathbb{N}^*$$

Pour déterminer une fonction d'onde $\psi(x, t)$ d'un état quelconque à partir de son état initial $\psi(x, 0)$, il suffit de la décomposer dans la base $\{\varphi_n\}_{n \in \mathbb{N}^*}$.

Rappel : $\varphi_n(x, t) = e^{-i E_n \cdot t} \cdot \varphi_n(x, 0)$ (\hbar) où $\varphi_n(x, 0) = \varphi_n(x)$ est appelée fonction d'onde indépendante du temps de l'état stationnaire d'énergie E_n .

Le puits plat infini tridimensionnel

On considère un potentiel tel que ;

$$V = 0 \quad \text{si} \quad \begin{cases} 0 < x < a \\ 0 < y < b \\ 0 < z < c \end{cases} \quad \text{et} \quad V = +\infty \text{ sinon.}$$

Les conditions aux limites s'écrivent ;

$$\begin{cases} \varphi(x=0, y, z) = 0 \\ \varphi(x=a, y, z) = 0 \\ \varphi(x, y=0, z) = 0 \\ \varphi(x, y=b, z) = 0 \\ \varphi(x, y, z=0) = 0 \\ \varphi(x, y, z=c) = 0 \end{cases}$$

La fonction d'onde est de la forme ;

$$\varphi(x, y, z) = A \cdot \sin(p_x \cdot x) \cdot \sin(p_y \cdot y) \cdot \sin(p_z \cdot z) \quad (\hbar)$$

avec $p_x = n_x \cdot \frac{\pi}{a}$, $p_y = n_y \cdot \frac{\pi}{b}$, $p_z = n_z \cdot \frac{\pi}{c}$ et $(n_x, n_y, n_z) \in (\mathbb{N}^*)^3$ (\hbar)

L'énergie de l'état stationnaire correspondant est alors ;

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2}{2m} \cdot \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad (\hbar)$$

La quantification de l'énergie par les trois nombres quantiques n_x , n_y et n_z amène à la dégénérescence des valeurs propres de l'énergie, plusieurs triplets (n_x, n_y, n_z) pouvant conduire à la même valeur propre.

La marche de potentiel

On considère un potentiel tel que ;

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ V_0 & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

On définit pour chacune des deux régions la fonction d'onde d'un état stationnaire d'énergie E qui est de la forme ;

Pour $x < 0$, $\varphi_E(x) = a_+ \cdot e^{i p_E \cdot x} + a_- \cdot e^{-i p_E \cdot x}$ (\hbar)

Pour $x > 0$, $\varphi_E(x) = a'_+ \cdot e^{i p'_E \cdot x} + a'_- \cdot e^{-i p'_E \cdot x}$

avec $p_E = (2m \cdot E)^{1/2}$ et $p'_E = [2m \cdot (E - V_0)]^{1/2}$ (\hbar)

La continuité de la densité de probabilité $\rho(x) = |\varphi_E(x)|^2$ implique en $x = 0$ que ;

$$|a_+ + a_-|^2 = |a'_+ + a'_-|^2$$

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée exige quant à elle que ;

$$\begin{cases} a_+ + a_- = a'_+ + a'_- \\ p_E \cdot (a_+ - a_-) = p'_E \cdot (a'_+ - a'_-) \end{cases}$$

Transmission et réflexion

Si on suppose qu'il existe une unique source de quantons située en $x = -\infty$ et que dans la région $x > 0$ il n'y a rien qui puisse envoyer ou renvoyer des quantons alors on a la condition ;

$$a'_- = 0$$

Ainsi, d'après les équations de continuité ;

$$\begin{cases} a_- = a_+ \cdot \frac{p_E - p'_E}{p_E + p'_E} \\ a'_+ = a_+ \cdot \frac{2p_E}{p_E + p'_E} \end{cases}$$

Cas où $E > V_0$;

Un effet spécifiquement quantique est que a_- est différent de 0. Il existe donc une probabilité de réflexion non nulle du quanton sur la marche même lorsque $E > V_0$. La densité de cette probabilité est $|a_-|^2$ (au coefficient de normalisation près).

On définit le **coefficient de réflexion** comme le rapport du courant réfléchi au courant incident ou la probabilité absolue de réflexion :

$$R = \frac{|a_-|^2}{|a_+|^2} = \left(\frac{p_E - p'_E}{p_E + p'_E} \right)^2$$

De même le **coefficient de transmission** est :

$$T = \frac{p'_E \cdot |a'_+|^2}{p_E \cdot |a_+|^2} = \frac{4p_E \cdot p'_E}{(p_E + p'_E)^2}$$

Il est tel que $R + T = 1$.

Remarque : si l'on considère un quanton représenté par un paquet d'ondes incident d'énergie moyenne E_0 dont la fonction d'onde correspondante est ;

$$\psi(x, t) = A \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(p) \cdot e^{i(p \cdot x - E_p \cdot t)} \cdot dp \quad (\hbar)$$

où $E_p = p^2 / 2m + V_0$.

Avant l'arrivée du paquet d'ondes sur la marche, $\hat{\psi}(p)$ présente un pic centré sur une valeur moyenne qui est ;

$$p_0 = (2m \cdot E_0)^{1/2}$$

Après la rencontre du paquet d'ondes avec la discontinuité, il y a un paquet d'ondes transmis et un paquet d'ondes réfléchi. Il n'y a pas d'interférence entre l'onde incidente et l'onde réfléchie.

Rebondissement

On s'intéresse au cas où $0 < E < V_0$. La fonction d'onde du quanton pour $x < 0$ est toujours de la forme ;

$$\varphi_E(x) = a_+ \cdot e^{i p_E \cdot x} + a_- \cdot e^{-i p_E \cdot x} \quad (\hbar)$$

Mais $p'_E = \pm [2m \cdot (E - V_0)]^{1/2} = \pm i \cdot \kappa'_E$ où $\kappa'_E = [2m \cdot (V_0 - E)]^{1/2}$ est réel, donc pour $x > 0$;

$$\varphi_E(x) = a'_+ \cdot e^{-\kappa'_E \cdot x} + a'_- \cdot e^{\kappa'_E \cdot x} \quad (\hbar)$$

Cette somme d'exponentielles réelles implique que $a'_- = 0$, ainsi ;

$$\varphi_E(x) = a'_+ \cdot e^{-\kappa'_E \cdot x} \quad (\hbar)$$

La probabilité pour que le quanton pénètre dans le mur de potentiel n'est donc pas nulle.

Cette pénétration n'est notable que sur une distance de l'ordre de $(\kappa'_E)^{-1}$. Les équations de continuité précédentes montrent que $|a_-| = |a_+|$ et que donc $R = 1$.

Pour $x < 0$, la fonction d'onde coïncide avec celle d'un quanton libre dans un état stationnaire d'énergie E dont les seules valeurs possibles de la quantité de mouvement sont p_E et $-p_E$. La densité de probabilité en quantité de mouvement a donc deux pics en p_E et en $-p_E$;

$$\sigma_{IE}(p) = \frac{1}{2} \cdot [\delta(p - p_E) + \delta(p + p_E)]$$

En considérant la partie de la fonction d'onde pour $x > 0$, celle-ci peut s'écrire comme une superposition d'ondes planes ;

$$\varphi_E(x) = A \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i p \cdot x} \cdot \hat{\varphi}_E(p) \cdot dp \quad \text{où } \hat{\varphi}_E(p) \text{ est l'amplitude de transition de l'état stationnaire}$$

d'énergie E du quanton *non libre* vers l'état de fonction d'onde $e^{i p \cdot x}$ qui est l'état propre correspondant à la valeur propre p de la quantité de mouvement du quanton *libre*, c'est-à-dire, $\langle u_p | u_E \rangle$. On en déduit ;

$$\hat{\phi}_E(p) = \frac{\text{Cste}}{p - i \cdot \kappa'_E}$$

Ainsi, la densité de probabilité de l'état considéré en quantité de mouvement est ;

$$\sigma_{2E}(p) = \frac{|\text{Cste}|^2}{p^2 + \kappa'^2_E}$$

La densité de probabilité totale en quantité de mouvement sera ;

$$\sigma_E(p) = \sigma_{1E}(p) + \sigma_{2E}(p)$$

Si on décrit le quanton par un paquet d'onde cet élargissement de la distribution en quantité de mouvement ne vaut que pendant l'intervalle de temps limité où le quanton interagit avec la barrière de potentiel. Le quanton n'est plus dans un état stationnaire.

Les énergies interdites : un quanton ne peut avoir une énergie inférieure à la valeur minimale du potentiel (car on ne peut pas assurer la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée). Une telle énergie est appelée **énergie interdite**.

Le puits plat fini

On considère un potentiel $V(x)$ tel que ;

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a/2 \\ -V_0 & \text{si } |x| < a/2 \end{cases}$$

La fonction d'onde d'un état stationnaire d'un quanton est de la forme ;

$$\begin{aligned} \text{Pour } x \leq -a/2, & \quad \varphi_E(x) = b_+ \cdot e^{i p_E \cdot x} + b_- \cdot e^{-i p_E \cdot x} \\ \text{Pour } |x| \leq a/2, & \quad \varphi_E(x) = c_+ \cdot e^{i p'_E \cdot x} + c_- \cdot e^{-i p'_E \cdot x} \quad (\hbar) \\ \text{Pour } x \geq a/2, & \quad \varphi_E(x) = d_+ \cdot e^{i p_E \cdot x} + d_- \cdot e^{-i p_E \cdot x} \end{aligned}$$

$$\text{Avec } \begin{cases} p_E = (2m \cdot E)^{1/2} \\ p'_E = [2m \cdot (E + V_0)]^{1/2} \end{cases}$$

Les états liés

On étudie les états stationnaires liés d'énergie E telle que $-V_0 < E < 0$. On pose alors ;

$$p_E = i \cdot \kappa_E \quad \text{où } \kappa_E = (-2m \cdot E)^{1/2} \text{ est réel}$$

Le milieu du puits étant à l'origine du repère, le module de la fonction d'onde doit être une fonction paire de x ;

$$|\varphi_E(x)| = |\varphi_E(-x)|$$

Il apparaît alors deux classes de fonctions d'onde, les fonctions paires et les fonctions impaires. Les coefficients doivent vérifier ;

$$b_- = \pm d_+$$

$$c_- = \pm c_+$$

$$d_- = \pm b_+$$

Il suffit donc de déterminer la fonction d'onde sur la demi-droite $x > 0$ pour en déduire la fonction d'onde sur $x < 0$ par symétrie. Les formes générales des deux classes de fonctions d'onde sont ;

(1) Les fonctions paires

$$\begin{cases} x < -a/2 & \varphi_E(x) = D \cdot e^{\kappa_E \cdot x} \\ |x| < a/2 & \varphi_E(x) = C \cdot \cos(p'_E \cdot x) \quad (\hbar) \\ x > a/2 & \varphi_E(x) = D \cdot e^{-\kappa_E \cdot x} \end{cases}$$

(2) Les fonctions impaires

$$\begin{cases} x < -a/2 & \varphi_E(x) = -D \cdot e^{\kappa_E \cdot x} \\ |x| < a/2 & \varphi_E(x) = C \cdot \sin(p'_E \cdot x) \\ x > a/2 & \varphi_E(x) = D \cdot e^{-\kappa_E \cdot x} \end{cases} \quad (\hbar)$$

La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en $x = a/2$ implique pour les fonctions paires ;

$$\begin{cases} C \cdot \cos(p'_E \cdot a/2) = D \cdot e^{-\kappa_E \cdot a/2} \\ -C \cdot p'_E \cdot \sin(p'_E \cdot a/2) = -\kappa_E \cdot D \cdot e^{-\kappa_E \cdot a/2} \end{cases} \quad (\hbar)$$

On établit alors les conditions ;

Pour les fonctions paires, $p'_E \cdot \tan(p'_E \cdot a/2) = \kappa_E \quad (\hbar)$

Pour les fonctions impaires, $p'_E \cdot \cotg(p'_E \cdot a/2) = -\kappa_E \quad (\hbar)$

L'énergie est quantifiée car seules les valeurs propres de celle-ci vérifient les conditions précédentes. Ces valeurs propres s'obtiennent en résolvant graphiquement les équations des conditions.

Remarque : les conditions précédentes peuvent s'écrire aussi ;

$$\cos(p'_E \cdot a) + \eta(E) \cdot \sin(p'_E \cdot a) = 0$$

où $\eta(E) = \frac{\kappa_E^2 - p'^2_E}{2\kappa_E \cdot p'_E}$.

Les états de diffusion

On étudie les états stationnaires d'énergie $E > 0$. On posera $d_- = 0$ pour signifier qu'il n'y a pas de source de quanta à droite. Les valeurs des autres coefficients sont fixées par les conditions de continuité imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points $x = \pm a/2$;

$$\begin{cases} b_+ \cdot e^{-i p'_E \cdot a/2} + b_- \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} = c_+ \cdot e^{-i p'_E \cdot a/2} + c_- \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} \\ p_E \cdot b_+ \cdot e^{-i p'_E \cdot a/2} - p_E \cdot b_- \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} = p'_E \cdot c_+ \cdot e^{-i p'_E \cdot a/2} - p'_E \cdot c_- \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} \\ c_+ \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} + c_- \cdot e^{-i p'_E \cdot a/2} = d_+ \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} \\ p'_E \cdot c_+ \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} + p'_E \cdot c_- \cdot e^{-i p'_E \cdot a/2} = p_E \cdot d_+ \cdot e^{i p'_E \cdot a/2} \end{cases} \quad (\hbar)$$

On définit les facteurs de transmission A_t et de réflexion A_r des amplitudes par ;

$$\begin{cases} b_- = A_r \cdot b_+ \\ d_+ = A_t \cdot b_+ \end{cases}$$

où

$$\begin{cases} A_r = \frac{i \cdot \frac{p'^2 - p^2}{2p \cdot p'} \cdot \sin(p' \cdot a)}{\cos(p' \cdot a) - i \cdot \frac{p'^2 + p^2}{2p \cdot p'} \cdot \sin(p' \cdot a)} \cdot e^{-i p \cdot a} \\ A_t = \frac{1}{\cos(p' \cdot a) - i \cdot \frac{p'^2 + p^2}{2p \cdot p'} \cdot \sin(p' \cdot a)} \cdot e^{-i p \cdot a} \end{cases} \quad (\hbar)$$

On en déduit les coefficients de réflexion et de transmission :

$$\left\{ \begin{array}{l} R = |A_r|^2 = \frac{\left(\frac{q^2}{2p \cdot p'}\right)^2 \cdot \sin^2(p'a)}{1 + \left(\frac{q^2}{2p \cdot p'}\right)^2 \cdot \sin^2(p'a)} \\ T = |A_t|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2p \cdot p'}\right)^2 \cdot \sin^2(p'a)} \end{array} \right. \quad (\hbar)$$

avec $q^2 = 2m \cdot V_0$.

On a ; $R + T = 1$

La diffusion est totalement inefficace et le puits est **transparent** lorsque $R = 0$ et $T = 1$ pour $p'a = n \cdot \pi$. (\hbar)

Il y a **résonance** lorsque R est maximum c'est-à-dire $p'a \cong (n + 1/2) \cdot \pi$. (\hbar)

L'effet tunnel

On considère une barrière de potentiel telle que ;

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a/2 \\ V_0 > 0 & \text{si } |x| < a/2 \end{cases}$$

Pour $E > V_0$, la barrière diffuse le quanton avec les mêmes coefficients de transmission et de réflexion que précédemment.

Mais pour $0 < E < V_0$, la probabilité de transmission à travers la barrière est cette fois-ci non nulle.

Un quanton venant heurter de la gauche la première marche, de hauteur V_0 , placée en $x = -a/2$, s'y réfléchit tout en possédant une extension spatiale. En effet, il déborde à l'intérieur de la marche sur une distance de l'ordre de $(\kappa')^{-1} = [2m \cdot (V_0 - E)]^{-1/2}$. Ainsi, pour une barrière de

largeur $a \leq 1/\kappa'$, la densité de probabilité $|\varphi(x)|^2$ prend des valeurs notables jusqu'à l'autre extrémité de la barrière. Après la traversée de cette seconde discontinuité, le quanton devient un quanton libre et sa densité de probabilité reste constante.

La fonction d'onde de l'état stationnaire d'énergie E s'écrit ;

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Pour } x < -a/2, \quad \varphi(x) = b_+ \cdot e^{i \cdot p \cdot x} + b_- \cdot e^{-i \cdot p \cdot x} \\ \text{Pour } |x| < a/2, \quad \varphi(x) = c_+ \cdot e^{-\kappa' \cdot x} + c_- \cdot e^{\kappa' \cdot x} \\ \text{Pour } x > a/2, \quad \varphi(x) = d_+ \cdot e^{i \cdot p \cdot x} \end{array} \right. \quad (\hbar)$$

où $p = (2m \cdot E)^{1/2}$ et $\kappa' = [2m \cdot (V_0 - E)]^{1/2}$.

Le spectre de diffusion d'un quanton par une barrière de potentiel est continue. Le facteur de transmission est ;

$$A_t = \frac{d_+}{b_+} = \frac{1}{\text{ch}(\kappa' \cdot a) - i \cdot \frac{p^2 - \kappa'^2}{2p \cdot \kappa'} \cdot \text{sh}(\kappa' \cdot a)} \cdot e^{-i \cdot p \cdot a} \quad (\hbar)$$

Le coefficient de transmission, qui n'est jamais nul et qui croît avec E , s'écrit ;

$$T = |A_t|^2 = \frac{1}{1 + \left(\frac{q^2}{2p \cdot \kappa'}\right)^2 \cdot \text{sh}^2(\kappa' \cdot a)} \quad (\hbar)$$

Le double puits infini

On s'intéresse à un potentiel $V(x)$ tel que :

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \in [-a-d, -d] \cup [d, a+d] \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}$$

Les états stationnaires d'un quanton sont données par la réunion des états stationnaires de chaque puits. Il y a une double série d'états stationnaires, ceux du puits de gauche et ceux du puits de droite :

Pour le puits de gauche ;

$$\varphi_n^{(G)}(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a} \cdot \sin(n \cdot \pi \cdot \frac{x+d}{a}) & \text{si } x \in [-a-d, -d] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\hbar)$$

$$\text{et } E_n^{(G)} = \frac{n^2 \cdot \pi^2}{2m \cdot a^2}, n \in \mathbb{N}^*$$

Pour le puits de droite ;

$$\varphi_n^{(D)}(x) = \begin{cases} \sqrt{2/a} \cdot \sin(n \cdot \pi \cdot \frac{x-d}{a}) & \text{si } x \in [d, a+d] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\hbar)$$

$$\text{et } E_n^{(D)} = \frac{n^2 \cdot \pi^2}{2m \cdot a^2}, n \in \mathbb{N}^*$$

Le spectre d'énergie du puits double est le même que celui du puits simple mais avec une dégénérescence d'ordre deux car $E_n^{(G)} = E_n^{(D)}$. Chaque niveau est **double**.

Les fonctions d'onde d'un niveau d'énergie dégénéré forment un espace vectoriel de dimension égale au degré de dégénérescence. Ainsi, $\psi(x, 0) = \alpha \cdot \varphi_n^{(G)}(x) + \beta \cdot \varphi_n^{(D)}(x)$ décrit un état stationnaire et $\psi(x, t) = \alpha \cdot e^{-iE_n^{(G)} \cdot t} \cdot \varphi_n^{(G)}(x) + \beta \cdot e^{-iE_n^{(D)} \cdot t} \cdot \varphi_n^{(D)}(x) = e^{-iE_n \cdot t} \cdot \psi(x, 0)$.

Une autre base est formée des fonctions ;

$$\begin{cases} \varphi_n^{(S)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot [\varphi_n^{(G)}(x) - \varphi_n^{(D)}(x)] \\ \varphi_n^{(A)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot [\varphi_n^{(G)}(x) + \varphi_n^{(D)}(x)] \end{cases}$$

Elles sont respectivement symétrique et antisymétrique.

V - Comportements collectifs de quanton identiques

Systemes composés

On s'intéresse tout d'abord à deux transitions quantiques effectuées par deux quantons *différents*. La transition du système composé, constitué par les deux quantons différents, consiste en deux transitions individuelles indépendantes ; elle se fait depuis un état initial caractérisé par le couple d'états individuels $(p^{(1)}, q^{(2)})$ vers un état final caractérisé par le couple d'états individuels $(r^{(1)}, s^{(2)})$.

Principe de factorisation composée :

Pour un système quantique composé effectuant une transition entre deux états caractérisés par des états individuels de ses composants, l'amplitude de probabilité de la transition est le produit des amplitudes de probabilité des transitions de chacun des sous-systèmes ;

$$\langle r^{(1)}, s^{(2)} | p^{(1)}, q^{(2)} \rangle = \langle r^{(1)} | p^{(1)} \rangle \cdot \langle s^{(2)} | q^{(2)} \rangle$$

La probabilité de transition étant ;

$$P^{(1,2)} = \left| \langle r^{(1)}, s^{(2)} | p^{(1)}, q^{(2)} \rangle \right|^2$$

Systèmes de deux quantons identiques

Soit ψ un état d'un système de deux quantons identiques. La probabilité de trouver les deux quantons dans les états individuels r et s est ;

$$P_{r,s \leftarrow \psi} = \left| \langle r, s | \psi \rangle \right|^2$$

Les deux quantons étant identiques et ne pouvant être étiquetés, on a ;

$$P_{s,r \leftarrow \psi} = P_{r,s \leftarrow \psi}$$

La probabilité de transition d'un système de deux quantons identiques à partir d'un état quelconque ψ vers un état caractérisé par deux états individuels est donc une fonction symétrique des symboles des états individuels.

Mais les amplitudes peuvent être symétriques ou antisymétriques ;

Symétrie : $\langle r, s | \psi \rangle = \langle s, r | \psi \rangle$

Antisymétrie : $\langle r, s | \psi \rangle = -\langle s, r | \psi \rangle$

Le caractère symétrique ou antisymétrique dépend exclusivement des quantons étudiés. Il existe deux grandes classes de quantons, ceux dont les amplitudes sont toujours symétriques et que l'on appelle **bosons** et ceux dont les amplitudes sont toujours antisymétriques et que l'on appelle **fermions**.

La grandeur du moment angulaire intrinsèque, ou spin, d'un quanton est quantifiée. Le carré du module du vecteur spin a pour valeur propre $s \cdot (s+1) \cdot \hbar^2$ et l'une de ses composantes les valeurs propres $[s \cdot \hbar, (s-1) \cdot \hbar, \dots, -s \cdot \hbar]$.

Connexion Spin-Statistique

Quanton de spin entier = boson

Quanton de spin demi-entier = fermion

Systèmes à N quantons identiques

On considère un système de N quantons identiques. L'amplitude de transition d'un état quelconque ψ vers un état collectif spécifié par N états individuels (r_1, \dots, r_N) est telle que ;

$$\langle r_1 \dots r_1 \dots r_j \dots r_N | \psi \rangle = \pm \langle r_1 \dots r_j \dots r_1 \dots r_N | \psi \rangle$$

Pour une permutation quelconque P des N états, suivant la nature des quantons, on a :

Bosons : $\langle P(r_1 \dots r_N) | \psi \rangle = \langle r_1 \dots r_N | \psi \rangle$

Fermions : $\langle P(r_1 \dots r_N) | \psi \rangle = \epsilon_P \cdot \langle r_1 \dots r_N | \psi \rangle$ où $\epsilon_P = \pm 1$ est la parité de la permutation P

Un quanton composé est un fermion si et seulement si le nombre de fermions parmi ses constituants est impair.

Principe d'exclusion de Pauli

Un ensemble de fermions ne peut jamais occuper une configuration d'états individuels dont deux soient identiques.

Principe de grégarité de Panurge

La probabilité d'obtenir un système de N bosons tous dans la même état individuel est N! fois supérieure à la probabilité analogue pour N quantons distincts. Les états collectifs où tous les bosons sont dans le même état individuel sont donc largement favorisés. Inversement, la probabilité qu'un système de bosons occupant ainsi les mêmes états individuels subisse une transition où l'un d'entre eux change d'état, est relativement beaucoup plus faible que dans le cas de quantons distincts (ou de fermions).

VI - Le moment angulaire

Le groupe des rotations

On se place dans l'espace euclidien à trois dimensions. On dit que l'espace est **isotrope** lorsqu'il est invariant par rotation. De même, l'espace est **homogène** lorsqu'il est invariant par translation. Les rotations laissent invariant la norme et le produit scalaire de deux vecteurs. L'ensemble des rotations forme un groupe.

Les matrices de rotations

Une rotation d'angle θ autour de l'axe (Oz) du plan(xOy), notée $R_z(\theta)$, est telle que ;

$$R_z(\theta) : \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

De même ;

$$R_x(\theta) : \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta) : \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & -\sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

Un vecteur \mathbf{r}' déduit de \mathbf{r} par rotation d'angle θ autour d'un axe de vecteur directeur normé \mathbf{n} est tel que ;

$$\mathbf{r}' = \cos \theta \cdot \mathbf{r} + (1 - \cos \theta) \cdot (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \cdot \mathbf{n} - \sin \theta \cdot \mathbf{n} \wedge \mathbf{r}$$

Si $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}$, la matrice de rotation s'écrit quant à elle ;

$$R_n(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta + (1 - \cos \theta)n_x^2 & (1 - \cos \theta)n_x n_y + \sin \theta \cdot n_z & (1 - \cos \theta)n_x n_z - \sin \theta \cdot n_y \\ (1 - \cos \theta)n_x n_y - \sin \theta \cdot n_z & \cos \theta + (1 - \cos \theta)n_y^2 & (1 - \cos \theta)n_y n_z + \sin \theta \cdot n_x \\ (1 - \cos \theta)n_x n_z + \sin \theta \cdot n_y & (1 - \cos \theta)n_y n_z - \sin \theta \cdot n_x & \cos \theta + (1 - \cos \theta)n_z^2 \end{pmatrix}$$

Pour une matrice de rotation quelconque R , on a ; $R^* = R^T = R^{-1}$ et $\det R = 1$.

Le spectre d'une matrice de rotation d'angle θ dans \forall est $\{1, e^{i\theta}, e^{-i\theta}\}$.

Un vecteur propre réel est le vecteur directeur de l'axe de rotation.

Enfin, $\text{Tr } R = 1 + 2 \cdot \cos \theta$.

Seules les rotations autour d'un même axe commutent.

Le moment angulaire

Le générateur infinitésimal des rotations et le moment angulaire

Pour un système quantique, l'isotropie de l'espace implique, d'après le théorème de Wigner, que toute rotation est représentée par un opérateur unitaire dans l'espace de Hilbert des états.

A toute rotation $R_n(\theta)$, on associe l'opérateur unitaire $U_n(\theta)$ tel que :

$$\begin{cases} U_n(\theta) \cdot U_n(\theta') = U_n(\theta + \theta') \\ U_n(\theta) = \exp(i \cdot J_n \cdot \theta) \end{cases} \quad (\hbar)$$

où J_n est le générateur infinitésimal des rotations autour de n . Il apparaît comme l'opérateur hermitique représentant la propriété physique **moment angulaire** du système dans la direction n . Les états propres de J_n sont invariants par rotation autour de n .

Dans un référentiel muni d'un repère orthonormé (Oxyz), il y a trois générateurs infinitésimaux qui sont les composantes du **moment angulaire J** :

$$\begin{cases} U_x(\theta) = \exp(i \cdot J_x \cdot \theta) \\ U_y(\theta) = \exp(i \cdot J_y \cdot \theta) \\ U_z(\theta) = \exp(i \cdot J_z \cdot \theta) \end{cases} \quad (\hbar)$$

J est un *opérateur vectoriel*. On a :

$$\begin{aligned} J_x &= J \cdot \hat{x} \\ J_y &= J \cdot \hat{y} \\ J_z &= J \cdot \hat{z} \end{aligned}$$

De même, J_n est la composante de J sur l'axe n (n_x, n_y, n_z) soit ;

$$J_n = J \cdot n = J_x \cdot n_x + J_y \cdot n_y + J_z \cdot n_z$$

Relations de commutation du moment angulaire

Le caractère non-commutatif des composantes du moment angulaire J le différencie des autres opérateurs vectoriels comme la position ou la quantité de mouvement :

$$J \wedge J = i \cdot J \Leftrightarrow \begin{cases} [J_x, J_y] = i \cdot J_z \\ [J_y, J_z] = i \cdot J_x \\ [J_z, J_x] = i \cdot J_y \end{cases} \quad (\hbar)$$

On en déduit les inégalités de Heisenberg telles que ;

$$\Delta J_x \cdot \Delta J_y \geq (1/2) \cdot \langle J_z \rangle$$

Le module au carré du moment angulaire, $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, commute avec toutes ses composantes ; $[J_n, J^2] = 0$

Rotation des grandeurs physiques

Une grandeur physique *scalaire*, représentée par un opérateur hermitique S , est invariante par rotation autour de tout axe et commute avec toutes les composantes du moment angulaire :

$$[J_n, S] = 0 \text{ ou } [J, S] = 0$$

On appelle **opérateur vectoriel**, une grandeur A obéissant à la loi de transformation par rotation ;

$$A' = R_n(\theta) \cdot A = U_n^{-1}(\theta) \cdot A \cdot U_n(\theta)$$

Les composantes de A , soit (A_x, A_y, A_z) dans une base orthonormée, sont des opérateurs dans un certain espace de Hilbert. Pour une rotation autour de l'axe (Oz), on aura ;

$$\begin{cases} U_z^{-1}(\theta) \cdot A_x \cdot U_z(\theta) = \cos \theta \cdot A_x + \sin \theta \cdot A_y \\ U_z^{-1}(\theta) \cdot A_y \cdot U_z(\theta) = -\sin \theta \cdot A_x + \cos \theta \cdot A_y \\ U_z^{-1}(\theta) \cdot A_z \cdot U_z(\theta) = A_z \end{cases}$$

Relations de commutation

$$\begin{cases} [J_x, A_x] = 0 \\ [J_x, A_y] = i \cdot A_z \\ [J_x, A_z] = -i \cdot A_y \end{cases} \quad (\hbar)$$

$$\begin{cases} [J_y, A_x] = -i \cdot A_z \\ [J_y, A_y] = 0 \\ [J_y, A_z] = i \cdot A_x \end{cases} \quad (\hbar)$$

$$\begin{cases} [J_z, A_x] = i \cdot A_y \\ [J_z, A_y] = -i \cdot A_x \\ [J_z, A_z] = 0 \end{cases} \quad (\hbar)$$

Plus généralement, $[J_n, A] = i \cdot A \wedge \mathbf{n}$. (\hbar)

Le module d'une grandeur vectorielle, dont le carré est défini par $A^2 = A_x^2 + A_y^2 + A_z^2$, est une grandeur scalaire ; $[J_n, A^2] = 0$

De même, le produit scalaire de deux grandeurs vectorielles est une grandeur scalaire ;

$$[J_n, A \cdot B] = [J_n, A_x B_x + A_y B_y + A_z B_z] = 0$$

Diagonalisation du moment angulaire

On note $J_z = J_0$. J^2 et J_0 commutant, tout espace propre de J^2 est stable par J_0 . J^2 et J_0 ont donc des vecteurs propres communs. Soit $|k, m\rangle$ un tel vecteur propre normé où k est la valeur propre de J^2 et m celle de J_0 ;

$$\begin{cases} J^2 \cdot |k, m\rangle = k \cdot |k, m\rangle \\ J_0 \cdot |k, m\rangle = m \cdot |k, m\rangle \end{cases}$$

On définit les opérateurs J_+ et J_- par :

$$\begin{cases} J_+ = J_x + i \cdot J_y \\ J_- = J_x - i \cdot J_y \end{cases}$$

On a : $J_+ = J_-^*$ et $J_- = J_+^*$

$$J_x = \frac{1}{2} \cdot (J_+ + J_-)$$

$$J_y = \frac{1}{2i} \cdot (J_+ - J_-) \quad (\hbar)$$

$$J^2 = \frac{1}{2} \cdot (J_+ J_- + J_- J_+) + J_0^2 = J_+ J_- + J_0^2 - J_0 = J_- J_+ + J_0^2 + J_0$$

Relations de commutation

$$[J_0, J_\pm] = i \cdot J_y \pm i \cdot (-i \cdot J_x) = \pm J_\pm$$

$$[J_+, J_-] = 2i \cdot [J_x, J_y] = 2J_0 \quad (\hbar)$$

$$[J^2, J_\pm] = 0$$

En notant $|g_\pm(k, m)\rangle = J_\pm \cdot |k, m\rangle$, on a :

$$J^2 \cdot |g_\pm(k, m)\rangle = k \cdot |g_\pm(k, m)\rangle \quad (\hbar)$$

$$J_0 \cdot |g_\pm(k, m)\rangle = (m \pm 1) \cdot |g_\pm(k, m)\rangle$$

Le **spectre de J^2** restreint au sous-espace engendré par les vecteurs propres communs à J^2 et J_0 est de la forme $\{k = j \cdot (j + 1), j \in N/2\}$. (\hbar)

Pour un j fixé, le **spectre de J_0** restreint au même sous-espace a $(2j + 1)$ valeurs propres qui sont les m tels que : $m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j$.

En posant $|k, m\rangle = |j, m\rangle$, on écrit :

$$\begin{cases} J^2 \cdot |j, m\rangle = j \cdot (j+1) \cdot |j, m\rangle \\ J_0 \cdot |j, m\rangle = m \cdot |j, m\rangle \\ J_{\pm} \cdot |j, m\rangle = \sqrt{(j \mp m) \cdot (j \pm m + 1)} \cdot |j, m \pm 1\rangle \end{cases} \quad (\hbar)$$

Remarque :
$$\begin{cases} J_+ \cdot |j, j\rangle = 0 \\ J_- \cdot |j, -j\rangle = 0 \end{cases}$$

En notant $N_{\pm}^2(k, m)$ la norme au carré de $|g_{\pm}(k, m)\rangle$ alors ;

$$N_{\pm}^2(k, m) = (j \mp m) \cdot (j \pm m + 1) \quad (\hbar)$$

Pour chaque valeur de j , il existe un espace de Hilbert, noté $h^{(j)}$, de dimension $(2j + 1)$ invariant sous l'action des opérateurs de moment angulaire. Une base de cet espace est donnée par les vecteurs propres de J_0 , on la note ; $B^{(j)} = \{|j, m\rangle, m = -j, \dots, j\}$. Les restrictions des opérateurs J_0, J_+ et J_- à $h^{(j)}$ sont respectivement $J_0^{(j)}, J_+^{(j)}$ et $J_-^{(j)}$.

Leurs éléments de matrice dans la base $B^{(j)}$ sont ;

$$\begin{cases} (J_0^{(j)})_{mm'} = m \cdot \delta_{m,m'} \\ (J_{\pm}^{(j)})_{mm'} = \sqrt{(j \mp m') \cdot (j \pm m' + 1)} \cdot \delta_{m,m' \pm 1} \end{cases} \quad (\hbar)$$

Un état quelconque d'un système se décompose sous la forme ;

$$|v\rangle = \sum_j \sum_{m=-j}^j c_{j,m} \cdot |j, m\rangle \quad (\hbar)$$

On note :

$$D_n^{(j)}(\theta) = \exp(i \cdot J_n^{(j)} \cdot \theta) \quad (\hbar)$$

l'opérateur dans $h^{(j)}$ correspondant à la rotation $R_n(\theta)$.

Les moments angulaires entiers et demi-entiers

On considère une rotation d'angle θ autour de l'axe (Oz) représentée par ;

$$U_z(\theta) = \exp(i \cdot J_z \cdot \theta) \quad (\hbar)$$

et un état propre de J_z , noté $|m\rangle$, tel que ;

$$J_z \cdot |m\rangle = m \cdot |m\rangle \quad (\hbar)$$

Alors ; $U_z(\theta) \cdot |m\rangle = e^{i \cdot m \cdot \theta} \cdot |m\rangle \quad (\hbar)$

Ainsi, un état quelconque $|v_0\rangle$, qui s'écrit $|v_0\rangle = \sum_m c_m \cdot |m\rangle$, devient après rotation :

$$|v_{\theta}\rangle = U_z(\theta) \cdot |v_0\rangle = \sum_m c_m \cdot e^{i \cdot m \cdot \theta} \cdot |m\rangle \quad (\hbar)$$

Pour $\theta = 2\pi$, on doit retrouver le même état qu'au départ, or ;

$$\begin{cases} |v_{2\pi}\rangle = \sum_{\substack{m=0,1,2,\dots \\ \text{(entiers)}}} c_m \cdot |m\rangle - \sum_{\substack{m=1/2,3/2,\dots \\ \text{(demi-entiers)}}} c_m \cdot |m\rangle \\ |v_0\rangle = \sum_{\substack{m=0,1,2,\dots \\ \text{(entiers)}}} c_m \cdot |m\rangle + \sum_{\substack{m=1/2,3/2,\dots \\ \text{(demi-entiers)}}} c_m \cdot |m\rangle \end{cases}$$

Donc les deux états ne peuvent être identiques que si l'une des deux sommes est nulle, c'est-à-dire qu'un système physique quelconque doit avoir un spectre de valeurs propres de J_z composé soit de valeurs toutes entières, soit de valeurs toutes demi-entières.

Il y a alors deux catégories de systèmes physiques ; ceux qui ont des valeurs propres entières sont appelés **bosons** et ceux qui ont des valeurs propres demi-entières sont appelés **fermions**.

Le moment angulaire orbital

On s'intéresse aux propriétés de la grandeur physique **moment angulaire orbital**, notée L et définie par ;

$$L = R \wedge P$$

où R et P sont les opérateurs vectoriels de position et de quantité de mouvement.

$$\begin{cases} L_x = Y \cdot P_z - Z \cdot P_y \\ L_y = Z \cdot P_x - X \cdot P_z \\ L_z = X \cdot P_y - Y \cdot P_x \end{cases}$$

Relations de commutation

$$[J_n, L] = i \cdot L \wedge n$$

$$\begin{cases} [L_x, A_x] = 0 \\ [L_x, A_y] = i \cdot A_z \\ [L_x, A_z] = -i \cdot A_y \end{cases}$$

$$\begin{cases} [L_y, A_x] = -i \cdot A_z \\ [L_y, A_y] = 0 \\ [L_y, A_z] = i \cdot A_x \end{cases}$$

$$\begin{cases} [L_z, A_x] = i \cdot A_y \\ [L_z, A_y] = -i \cdot A_x \\ [L_z, A_z] = 0 \end{cases}$$

$$\text{avec } \begin{cases} A_x = X \text{ ou } P_x \\ A_y = Y \text{ ou } P_y \\ A_z = Z \text{ ou } P_z \end{cases} \quad (\hbar)$$

Ces relations donnent plus simplement ;

$$\begin{cases} [L_n, R] = i \cdot R \wedge n \\ [L_n, P] = i \cdot P \wedge n \end{cases} \quad (\hbar)$$

Et,

$$\begin{cases} [L_x, L_y] = i \cdot L_z \\ [L_y, L_z] = i \cdot L_x \\ [L_z, L_x] = i \cdot L_y \end{cases} \quad (\hbar)$$

Tout comme J précédemment, L^2 et $L_0 (= L_z)$ commutent et ont donc des états propres communs, notés $|\ell, m\rangle$ et tels que ;

$$\begin{cases} L^2 \cdot |\ell, m\rangle = \ell \cdot (\ell + 1) \cdot |\ell, m\rangle \\ L_0 \cdot |\ell, m\rangle = m \cdot |\ell, m\rangle \end{cases} \quad (\hbar)$$

On se place en réalisation r où l'espace de Hilbert H_r est celui des fonctions à valeur complexe de carré sommable dans \mathbb{R}^3 ; $H_r = H_x \otimes H_y \otimes H_z$. On a alors ;

$$\begin{cases} R = r \\ P = -i \cdot \nabla_r \end{cases} \quad (\hbar)$$

On en déduit ;

$$L = -i \cdot r \wedge \nabla_r \quad (\hbar)$$

Les états propres communs à L^2 et L_0 sont des fonctions d'ondes particulières notées ;

$$\eta_{\ell m}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \ell, m \rangle$$

Une fonction d'onde quelconque s'écrira (s'il n'y a pas de dégénérescence en (ℓ, m)) ;

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\ell, m} \gamma_{\ell m} \cdot \eta_{\ell m}(\mathbf{r})$$

Comme $U(2\pi) \cdot \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$, le moment angulaire orbital ne peut prendre que des valeurs entières c'est-à-dire les nombres m et ℓ sont des entiers.

En coordonnées cartésiennes :

$$\begin{cases} L_x = -i \cdot (y \cdot \frac{\partial}{\partial z} - z \cdot \frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y = -i \cdot (z \cdot \frac{\partial}{\partial x} - x \cdot \frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z = -i \cdot (x \cdot \frac{\partial}{\partial y} - y \cdot \frac{\partial}{\partial x}) \end{cases} \quad (\hbar)$$

En coordonnées sphériques :

$$\begin{cases} x = r \cdot \sin \theta \cdot \cos \varphi \\ y = r \cdot \sin \theta \cdot \sin \varphi \\ z = r \cdot \cos \theta \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} L_0 = -i \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ L_{\pm} = e^{\pm i \cdot \varphi} \cdot (i \cdot \cot \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \pm \frac{\partial}{\partial \theta}) \end{cases} \quad (\hbar)$$

$$\text{Et } L^2 = -\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \cot \theta \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\hbar)$$

D'après l'indépendance en r de L , les équations aux valeurs propres de L^2 et L_0 ne peuvent fixer que la forme fonctionnelle de $\eta_{\ell m}(\mathbf{r})$ par rapport aux variables angulaires et c'est là que se manifeste la dégénérescence en (ℓ, m) qui conduit à une spécification supplémentaire de la base :

$$\eta_{\ell m}(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}) \cdot Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$$

La fonction $\chi(\mathbf{r})$ est arbitraire mais Y_{ℓ}^m obéit à ;

$$\begin{cases} L_0 \cdot Y_{\ell}^m = m \cdot Y_{\ell}^m \\ L^2 \cdot Y_{\ell}^m = \ell \cdot (\ell + 1) \cdot Y_{\ell}^m \end{cases} \quad (\hbar)$$

On déduit de ces équations :

$$\begin{cases} Y_{\ell}^{\ell}(\theta, \varphi) = c_{\ell} \cdot e^{i \cdot \ell \cdot \varphi} \cdot (\sin \theta)^{\ell} \\ Y_{\ell}^{\ell-1}(\theta, \varphi) = c'_{\ell} \cdot \cos \theta \cdot (\sin \theta)^{2\ell-1} \cdot e^{i \cdot (\ell-1) \cdot \varphi} \end{cases}$$

$$\text{où } c_{\ell} \text{ et } c'_{\ell} \text{ sont des constantes de normalisation : } c_{\ell} = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell} \cdot \ell!} \cdot \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

Remarque :

$$Y_{\ell}^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} \cdot P_{\ell}(\cos \theta)$$

$$\text{où } P_{\ell}(\cos \theta) \text{ est le polynôme de Legendre ; } P_{\ell}(X) = \frac{1}{2^{\ell} \cdot \ell!} \cdot \frac{d^{\ell}}{dX^{\ell}} [(X^2 - 1)^{\ell}]$$

Propriétés

En notant $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$ le vecteur unitaire dans la direction (θ, φ) , on peut noter $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = Y_{\ell}^m(\mathbf{n})$.

Ainsi, $\delta(\varphi - \varphi') \cdot \delta(\cos \theta - \cos \theta') = \delta^{(2)}(\mathbf{n}' - \mathbf{n})$ et ;

$$\iint \overline{Y_{\ell'}^{m'}}(\mathbf{n}) \cdot Y_{\ell}^m(\mathbf{n}) \cdot d^2\mathbf{n} = \delta_{\ell\ell'} \cdot \delta_{mm'} \quad (\text{Orthogonalité})$$

$$\sum_{\ell=0}^{+\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^m(\mathbf{n}') \cdot Y_{\ell}^m(\mathbf{n}) = \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}') \quad (\text{Complétude})$$

$$Y_{\ell}^m(\mathbf{R} \cdot \mathbf{n}) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} (D^{(\ell)}(\mathbf{R}))_{mm'} \cdot Y_{\ell}^{m'}(\mathbf{n}) \quad (\text{Transformation par rotation})$$

$$\sum_{m=-\ell}^{\ell} \overline{Y_{\ell}^m(\mathbf{n}')} \cdot Y_{\ell}^m(\mathbf{n}) = \frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot P_{\ell}(\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n}) \quad (\text{Théorème d'addition})$$

$$\overline{Y_{\ell}^m(\mathbf{n})} = (-1)^m \cdot Y_{\ell}^{-m}(\mathbf{n}) \quad (\text{Conjugaison})$$

$$Y_{\ell}^m(-\mathbf{n}) = (-1)^{\ell} \cdot Y_{\ell}^m(\mathbf{n}) \quad (\text{Parité})$$

$$\iint Y_{\ell}^m(\mathbf{n}) \cdot e^{i\mathbf{n} \cdot \mathbf{s}} \cdot d^2\mathbf{n} = i \cdot \ell \cdot Y_{\ell}^m(\mathbf{s}) \quad (\text{Transformation de Fourier})$$

Les premières harmoniques sphériques

$$\ell = 0$$

$$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$\ell = 1$$

$$\begin{cases} Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{i\varphi} \\ Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos \theta \\ Y_1^{-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta \cdot e^{-i\varphi} \end{cases}$$

$$\ell = 2$$

$$\begin{cases} Y_2^2(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{2i\varphi} \\ Y_2^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cdot \cos \theta \cdot \sin \theta \cdot e^{i\varphi} \\ Y_2^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \cdot (3\cos^2 \theta - 1) \\ Y_2^{-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \cdot \cos \theta \cdot \sin \theta \cdot e^{-i\varphi} \\ Y_2^{-2}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \cdot \sin^2 \theta \cdot e^{-2i\varphi} \end{cases}$$

On appelle **rotateur** un système physique dont les seuls degrés de liberté sont ceux qui correspondent à son orientation spatiale. Un rotateur est dit sphérique si ses propriétés géométriques sont isotropes c'est-à-dire si ses moments d'inertie par rapport à ses axes principaux ont la même valeur, notée I.

Le hamiltonien d'un rotateur quantique s'écrit ; $H = \frac{L^2}{2I}$

Ses valeurs propres sont donc ; $E_\ell = \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{2I}$ où ℓ est entier (\hbar)

Le spin

L'opérateur S, appelé moment angulaire intrinsèque ou **spin**, est défini par ;

$$S = J - L$$

S est un opérateur vectoriel et un moment angulaire, on a les relations de commutations ;

$$\begin{cases} [S_x, S_y] = i \cdot S_z \\ [S_y, S_z] = i \cdot S_x \\ [S_z, S_x] = i \cdot S_y \end{cases} \quad (\hbar)$$

S commute avec les opérateurs R, P et L , et toutes les combinaisons linéaires de ces grandeurs;

$$[S_n, R] = 0$$

$$[S_n, P] = 0$$

$$[S_n, L] = 0$$

S est donc invariante par translation spatiale et par transformation galiléenne.

L'indépendance de S par rapport aux autres grandeurs physiques implique que l'opérateur correspondant n'agit pas sur les mêmes variables que R, P... L'espace de Hilbert des états H apparaît comme un produit tensoriel :

$$H = H_0 \otimes H_s$$

où H_0 est l'espace de Hilbert orbital ou spatial sur lequel agissent R, P...et H_s est l'espace de Hilbert sur lequel agissent les opérateurs S.

Ainsi, J se décompose sous la forme ;

$$J = L \otimes I_s + I_0 \otimes S$$

où I_0 et I_s sont les opérateurs identités dans H_0 et H_s .

En généralisant la réalisation r, on choisit une base faite des états propres de R, S^2 et S_0 , soit les états $|\mathbf{r}; s, \mu\rangle$ tels que :

$$\begin{cases} R \cdot |\mathbf{r}; s, \mu\rangle = r \cdot |\mathbf{r}; s, \mu\rangle \\ S^2 \cdot |\mathbf{r}; s, \mu\rangle = s \cdot (s + 1) \cdot |\mathbf{r}; s, \mu\rangle \\ S_0 \cdot |\mathbf{r}; s, \mu\rangle = \mu \cdot |\mathbf{r}; s, \mu\rangle \end{cases} \quad (\hbar)$$

Dans cette base, un vecteur quelconque s'écrit ;

$$|v\rangle = \int \sum_{s, \mu} |\mathbf{r}; s, \mu\rangle \langle \mathbf{r}; s, \mu | v \rangle \cdot d^3r$$

Et ses composantes seront ;

$$\psi(\mathbf{r}; s, \mu) = \langle \mathbf{r}; s, \mu | v \rangle$$

Un quanton est caractérisé par une valeur unique de s (on dit qu'il a un spin s) qui peut être entier ou semi-entier. Pour un quanton de spin s, l'espace des états de spin est l'espace propre correspondant de S^2 , de dimension $(2s + 1)$. Le quanton sera donc caractérisé par $(2s + 1)$ fonctions d'onde en réalisation r :

$$\Psi_\mu(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}; \mu) = \langle \mathbf{r}; \mu | v \rangle$$

où $\mu = -s, -s + 1, \dots, s - 1, s$.

Annexe 1

Potentiels centraux et atome d'hydrogène

I - Les potentiels centraux

Etude des états stationnaires

On s'intéresse aux propriétés quantiques d'une particule de masse m plongée dans un potentiel central $V(r)$ où r exprime la distance à l'origine des coordonnées. $V(r)$ est invariant par rotation autour de l'origine des coordonnées.

En réalisation r , l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \Delta + V(r) \right] \cdot \varphi(\mathbf{r}) = E \cdot \varphi(\mathbf{r})$$

$$\text{où } \Delta = \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{\tan \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right).$$

L'hamiltonien est quant à lui ;

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{2m \cdot r^2} \cdot L^2 + V(r)$$

Puisque H , L^2 et L_0 commutent, ils ont des états propres communs $\varphi(\mathbf{r})$ tels que ;

$$\begin{cases} H \cdot \varphi(\mathbf{r}) = E \cdot \varphi(\mathbf{r}) \\ L^2 \cdot \varphi(\mathbf{r}) = \ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2 \cdot \varphi(\mathbf{r}) \\ L_0 \cdot \varphi(\mathbf{r}) = m \cdot \hbar \cdot \varphi(\mathbf{r}) \end{cases}$$

Les solutions de ces équations sont de la forme :

$$\varphi(\mathbf{r}) = R(r) \cdot Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

La fonction $R(r)$ doit vérifier, après simplification, l'équation radiale ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{r} \cdot \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2m \cdot r^2} + V(r) \right] \cdot R(r) = E \cdot R(r)$$

L'équation dépendant de ℓ , on note $E_{k,\ell}$ la valeur propre associée à une valeur de ℓ (où l'indice k permet de repérer les différentes valeurs propres). De même, on posera ;

$$R(r) = R_{k,\ell}(r) = \frac{1}{r} \cdot u_{k,\ell}(r)$$

Ainsi,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2m \cdot r^2} + V(r) \right] \cdot u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} \cdot u_{k,\ell}(r)$$

avec la condition ; $u_{k,\ell}(0) = 0$

Cette équation est analogue à celle qu'on aurait à résoudre dans un problème à une dimension où une particule de masse m serait soumise à se déplacer dans un **potentiel effectif** $V_{\text{eff}}(r)$ tel que ;

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2m \cdot r^2}$$

où la variable r ne peut être que positive ou nulle.

Le terme ajouté à $V(r)$ est appelé **potentiel centrifuge**.

Conclusion :

Le fait que $V(r)$ soit indépendant de θ et φ permet :

1. d'imposer aux fonctions propres de H d'être simultanément fonctions propres de L^2 et L_0 , ce qui fixe leur dépendance angulaire ;

$$\varphi_{k,\ell,m}(\mathbf{r}) = R_{k,\ell}(r) \cdot Y_{\ell}^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{r} \cdot u_{k,\ell}(r) \cdot Y_{\ell}^m(\theta, \varphi).$$

2. de remplacer l'équation aux valeurs propres de H , équations aux dérivées partielles en r, θ, φ , par une équation différentielle portant sur la seule variable r dépendant d'un paramètre ℓ .

Les fonctions $\varphi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ sont en principe normalisables c'est-à-dire :

$$\int |\varphi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi)|^2 \cdot r^2 \cdot dr \cdot d\Omega = 1$$

Les harmoniques sphériques $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ étant normées, cette condition équivaut à :

$$\int_0^{+\infty} r^2 \cdot |R_{k,\ell}(r)|^2 \cdot dr = \int_0^{+\infty} |u_{k,\ell}(r)|^2 \cdot dr = 1$$

En réalité, si le spectre de H présente une partie continue, on imposera aux fonctions propres correspondantes d'être orthonormées au sens large, c'est-à-dire de vérifier une condition de la forme :

$$\int_0^{+\infty} r^2 \cdot \overline{R_{k',\ell}(r)} \cdot R_{k,\ell}(r) \cdot dr = \int_0^{+\infty} \overline{u_{k',\ell}(r)} \cdot u_{k,\ell}(r) \cdot dr = \delta(k'-k)$$

où k est un indice continu qu'on appelle **nombre quantique radial**.

ℓ est appelé **nombre quantique azimutal** et m , **nombre quantique magnétique**.

La partie radiale $R_{k,\ell}(r)$ de la fonction propre et la valeur propre $E_{k,\ell}$ de H sont indépendantes du nombre quantique magnétique. La partie angulaire de la fonction propre dépend de ℓ et de m mais pas de k ; elle est la même quelle que soit la forme du potentiel $V(r)$.

Dégénérescence des niveaux d'énergie

Les $(2\ell + 1)$ fonctions $\varphi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$ avec k et ℓ fixés et m variant de $-\ell$ à ℓ sont des fonctions propres de H avec la même valeur propre $E_{k,\ell}$. Le niveau $E_{k,\ell}$ est donc au moins $(2\ell + 1)$ fois dégénéré. Cette dégénérescence est appelée **dégénérescence essentielle**.

Mais il peut arriver qu'une valeur propre $E_{k,\ell}$ coïncide avec une valeur propre $E_{k',\ell'}$ où $\ell' \neq \ell$. Cette dégénérescence qui ne se produit qu'avec certains potentiels particuliers est qualifiée de **dégénérescence accidentelle**.

Pour une valeur fixée ℓ , l'équation radiale admet au plus une solution physiquement acceptable pour chaque valeur propre $E_{k,\ell}$ car elle doit répondre à la condition ; $u_{k,\ell}(0) = 0$.

Si l'on fixe les trois valeurs propres de H, L^2 et L_0 qui sont respectivement $E_{k,\ell}$, $\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2$ et $m \cdot \hbar$, on définit de manière unique une fonction propre $\varphi_{k,\ell,m}(r, \theta, \varphi)$:

La valeur propre de L^2 indique quelle équation donne la fonction radiale, la valeur propre de H fixe de manière unique cette fonction radiale et pour ℓ et m donnés il n'existe qu'une seule harmonique sphérique.

Systeme de deux particules en interaction

On considère un système de deux particules sans spin, de masses respectives m_1 et m_2 . On note R_1, P_1 et R_2, P_2 les opérateurs qui décrivent les positions et les impulsions de ces particules. On a les relations de commutations canoniques :

$$\begin{cases} [R_1, P_1] = i \cdot \hbar \\ [R_2, P_2] = i \cdot \hbar \end{cases}$$

On définit les opérateurs R et R_G par :

$$\begin{cases} R_G = \frac{m_1 \cdot R_1 + m_2 \cdot R_2}{m_1 + m_2} \\ R = R_1 - R_2 \end{cases}$$

De même, les opérateurs P_G et P sont tels que :

$$\begin{cases} P_G = P_1 + P_2 \\ P = \frac{m_2 \cdot P_1 - m_1 \cdot P_2}{m_1 + m_2} \end{cases}$$

Les relations de commutations sont alors :

$$\begin{cases} [R_G, P_G] = i \cdot \hbar \\ [R, P] = i \cdot \hbar \end{cases}$$

L'opérateur hamiltonien h du système est ;

$$H = \frac{P_1^2}{2m_1} + \frac{P_2^2}{2m_2} + V(R_1 - R_2) = \frac{P_G^2}{2M} + \frac{P^2}{2\mu} + V(R)$$

où $M = m_1 + m_2$ et $\mu = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$.

L'hamiltonien apparaît comme la somme de deux termes H_G et H_r tels que :

$$\begin{cases} H_G = \frac{P_G^2}{2M} \\ H_r = \frac{P^2}{2\mu} + V(R) \end{cases}$$

Et $[H_G, H_r] = 0$, donc H_G et H_r commutent également avec H et il existe une base de vecteurs propres communs :

$$\begin{cases} H_G \cdot |\varphi\rangle = E_G \cdot |\varphi\rangle \\ H_r \cdot |\varphi\rangle = E_r \cdot |\varphi\rangle \end{cases} \Rightarrow H \cdot |\varphi\rangle = E \cdot |\varphi\rangle \quad \text{avec } E = E_G + E_r$$

Dans la représentation (r_G, r), on note $|r_G, r\rangle$ les vecteurs de base qui sont les vecteurs propres communs à R_G et R. Un état est alors représenté par la fonction d'onde $\varphi(r_G, r)$ qui dépend de six variables. L'action des opérateurs R_G et R se traduit par la multiplication des fonctions d'onde par les variables r_G et r respectivement. P_G et P deviennent des opérateurs différentiels ;

$$\begin{cases} P_G = \frac{i}{\hbar} \cdot \nabla_G \\ P = \frac{i}{\hbar} \cdot \nabla \end{cases}$$

où on dérive par rapport à x_G, y_G et z_G et par rapport à x, y z.

L'espace des états H du système peut être considéré comme le produit tensoriel H_{r_G} ⊗ H_r de l'espace des états associé à R_G avec celui associé à R. Les vecteurs propres $|\varphi\rangle$ sont de la forme :

$$|\varphi\rangle = |\varphi_G\rangle \otimes |\varphi_r\rangle$$

avec

$$\begin{cases} H_G \cdot |\varphi_G\rangle = E_G \cdot |\varphi_G\rangle \\ |\varphi_G\rangle \in H_{r_G} \end{cases}$$

$$\begin{cases} H_r \cdot |\varphi_r\rangle = E_r \cdot |\varphi_r\rangle \\ |\varphi_r\rangle \in H_r \end{cases}$$

Dans la représentation (r_G, r) , ces équations donnent :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2M} \cdot \Delta_G \varphi_G(r_G) = E_G \cdot \varphi_G(r_G) \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + V(r) \right] \cdot \varphi_r(r) = E_r \cdot \varphi_r(r) \end{cases}$$

La première de ces équations montre que la particule associée au centre de masse du système est libre. Ses solutions sont par exemple les ondes planes :

$$\varphi_G(r_G) = \frac{1}{(2\pi \cdot \hbar)^{3/2}} \cdot e^{(i/\hbar) \cdot p_G \cdot r_G}$$

dont l'énergie vaut : $E_G = \frac{p_G^2}{2M}$.

Cette énergie cinétique qui correspond à une translation d'ensemble du système peut prendre n'importe quelle valeur positive ou nulle.

Remarque :

Le moment cinétique total du système des deux particules réelles est :

$$J = L_1 + L_2$$

avec

$$\begin{cases} L_1 = R_1 \times P_1 \\ L_2 = R_2 \times P_2 \end{cases}$$

Mais il peut aussi s'écrire ;

$$J = L_G + L$$

avec

$$\begin{cases} L_G = R_G \times P_G \\ L = R \times P \end{cases}$$

II - L'atome d'hydrogène

Introduction

L'atome d'hydrogène est constitué d'un proton de masse : $m_p = 1,7 \times 10^{-27}$ kg , de charge : $q = 1,6 \times 10^{-19}$ C , et d'un électron de masse : $m_e = 0,91 \times 10^{-30}$ kg et de charge $-q$.

L'interaction entre ces deux particules est essentiellement électrostatique et l'énergie potentielle d'interaction est :

$$V(r) = -\frac{q^2}{4\pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} = -\frac{e^2}{r}$$

où r est la distance entre les deux particules et $e^2 = \frac{q^2}{4\pi \cdot \epsilon_0}$.

Théorie quantique de l'atome d'hydrogène

Dans la réalisation r , l'équation aux valeurs propres de l'hamiltonien H s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \Delta - \frac{e^2}{r} \right] \cdot \varphi(r) = E \cdot \varphi(r)$$

où $\mu = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} \cong m_e \cdot \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right)$.

Le potentiel étant central, les fonctions propres φ sont de la forme :

$$\varphi_{k,\ell,m}(r) = \frac{1}{r} \cdot u_{k,\ell}(r) \cdot Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

La fonction $u_{k,\ell}(r)$ doit vérifier :

$$\begin{cases} \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell \cdot (\ell + 1) \cdot \hbar^2}{2\mu \cdot r^2} - \frac{e^2}{r} \right] \cdot u_{k,\ell}(r) = E_{k,\ell} \cdot u_{k,\ell}(r) \\ u_{k,\ell}(0) = 0 \end{cases}$$

En notant $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu \cdot e^2}$ et $E_I = \frac{\mu \cdot e^4}{2 \cdot \hbar^2}$, on effectue un changement de variables en introduisant les quantités sans dimension :

$$\begin{cases} \rho = r / a_0 \\ \lambda_{k,\ell} = \sqrt{-E_{k,\ell} / E_I} \end{cases}$$

L'équation radiale devient alors :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{\rho^2} + \frac{2}{\rho} - \lambda_{k,\ell}^2 \right] \cdot u_{k,\ell}(\rho) = 0$$

Comportement asymptotique

Lorsque ρ tend vers l'infini, les termes en $1/\rho$ et en $1/\rho^2$ deviennent négligeables devant le terme constant $\lambda_{k,\ell}^2$ et l'équation radiale se simplifie et devient :

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \lambda_{k,\ell}^2 \right] \cdot u_{k,\ell}(\rho) = 0$$

La seule solution acceptable physiquement est $e^{-\rho \cdot \lambda_{k,\ell}}$.

En effectuant le changement de fonction $u_{k,\ell}(\rho) = e^{-\rho \cdot \lambda_{k,\ell}} \cdot y_{k,\ell}(\rho)$, l'équation différentielle que doit vérifier $y_{k,\ell}(\rho)$ est :

$$\left\{ \frac{d^2}{d\rho^2} - 2\lambda_{k,\ell} \cdot \frac{d}{d\rho} + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{\ell \cdot (\ell + 1)}{\rho^2} \right] \right\} \cdot y_{k,\ell}(\rho) = 0$$

avec la condition : $y_{k,\ell}(0) = 0$

Recherche des solutions sous forme de séries entières

On considère le développement en série entière de $y_{k,\ell}(\rho)$; $y_{k,\ell}(\rho) = \rho^s \cdot \sum_{q=0}^{+\infty} c_q \cdot \rho^q$

Par définition, c_0 est le premier coefficient non nul et la condition $y_{k,\ell}(0) = 0$ implique que s est strictement positif.

En dérivant et en remplaçant dans l'équation différentielle précédente, le coefficient du terme de plus bas degré en ρ^{s-2} est nul :

$$[-\ell \cdot (\ell + 1) + s \cdot (s - 1)] \cdot c_0 = 0$$

On en déduit que s peut prendre une des deux valeurs :

$$\begin{cases} s = \ell + 1 \\ s = -\ell \end{cases}$$

Mais $s > 0$, donc $s = \ell + 1$. La nullité du coefficient du terme général en ρ^{q+s-2} donne :

$$q \cdot (q + 2\ell + 1) \cdot c_q = 2 \cdot [(q + \ell) \cdot \lambda_{k,\ell} - 1] \cdot c_{q-1}$$

En fixant c_0 , on détermine par récurrence tous les coefficients. Comme c_q/c_{q-1} tend vers 0 lorsque q tend vers l'infini, le rayon de convergence est infini.

Quantification de l'énergie

Afin d'obtenir le comportement asymptotique dominé par $e^{-\rho \cdot \lambda_{k,\ell}}$, $y_{k,\ell}$ doit être un polynôme.

Pour que $y_{k,\ell}$ soit un polynôme, il faut qu'il existe un entier k tel que $q = k$ qui annule, dans la dernière expression, le crochet du deuxième membre ; $[(k + \ell) \cdot \lambda_{k,\ell} - 1] = 0$

On a alors : $\lambda_{k,\ell} = \frac{1}{k + \ell}$ où $k > 0$

Pour un ℓ fixé, les seules énergies négatives possibles sont :

$$E_{k,\ell} = -\frac{E_I}{(k + \ell)^2} \text{ avec } k = 1, 2, 3, \dots$$

La relation de récurrence permettant de trouver c_q s'écrit :

$$c_q = (-1)^q \cdot \left(\frac{2}{k + \ell} \right)^q \cdot \frac{(k - 1)!}{(k - q - 1)!} \cdot \frac{(2\ell + 1)!}{q! \cdot (q + 2\ell + 1)!} \cdot c_0$$

Le coefficient c_0 est déterminé à un facteur de phase près par la condition de normalisation. On peut alors déterminer les fonctions radiales.

Exemples :

$$R_{k=1,\ell=0}(r) = 2(a_0)^{-3/2} \cdot e^{-r/a_0}$$

$$R_{k=2,\ell=0}(r) = 2(2a_0)^{-3/2} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) \cdot e^{-r/2a_0}$$

$$R_{k=1,\ell=1}(r) = (2a_0)^{-3/2} \cdot \frac{r}{\sqrt{3} \cdot a_0} \cdot e^{-r/2a_0}$$

Paramètres atomiques

$$\begin{cases} E_I = \frac{1}{2} \cdot \alpha^2 \cdot \mu \cdot c^2 \cong 13,6 \text{ eV} \\ a_0 = \frac{1}{\alpha} \cdot \lambda_c \cong 0,52 \text{ \AA} \end{cases}$$

où α est la constante de structure fine et λ_c est pratiquement égale à la longueur d'onde de Compton de l'électron :

$$\begin{cases} \alpha = \frac{e^2}{\hbar \cdot c} = \frac{q^2}{4\pi \cdot \epsilon_0 \cdot \hbar \cdot c} \cong \frac{1}{137} \\ \lambda_c = \frac{\hbar}{\mu \cdot c} \cong \frac{\hbar}{m_e \cdot c} \cong 3,8 \times 10^{-3} \text{ \AA} \end{cases}$$

Niveaux d'énergie

Dans le cas particulier de l'atome d'hydrogène, les valeurs propres de l'énergie $E_{k,\ell}$ ne dépendent pas de k et de ℓ mais seulement de leur somme. On pose alors $n = k + \ell$ et les différents niveaux d'énergie deviennent ;

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2} \quad \text{avec } n = 1, 2, \dots$$

n est appelé **nombre quantique principal**.

Pour n fixé, $\ell = 0, 1, \dots, n-1$. On dit que la couche caractérisée par n comporte n sous-couches correspondant chacune à une valeur de ℓ . Chaque sous-couche comporte $(2\ell + 1)$ états distincts, associés aux $(2\ell + 1)$ valeurs possibles de m pour ℓ fixé.

La dégénérescence totale du niveau d'énergie E_n est donc :

$$g_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$$

L'existence du spin de l'électron multiplie par deux ce nombre. Si l'on tient compte aussi du spin du proton, on multiplie encore par deux le résultat.

Pour un niveau d'énergie E_n , la densité de probabilité de présence de l'électron est proportionnelle à ;

$$f_n(r) = \left(\frac{r}{a_0}\right)^{2n} \cdot e^{-2r/n \cdot a_0}$$

Cette fonction présente un maximum pour $r = n^2 \cdot a_0$ qui est appelé **rayon de l'orbite de Bohr** correspondant à l'énergie E_n .

Fonction d'onde des premiers niveaux d'énergie

Niveau 1s

$$\varphi_{n=1,\ell=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot a_0^3}} \cdot e^{-r/a_0}$$

Niveau 2s

$$\varphi_{n=2,\ell=0,m=0} = \frac{1}{\sqrt{8\pi \cdot a_0^3}} \cdot \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \cdot e^{-r/2a_0}$$

Niveau 2p

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_{n=2,\ell=1,m=1} = -\frac{1}{8\sqrt{\pi \cdot a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-r/2a_0} \cdot \sin \theta \cdot e^{i\phi} \\ \varphi_{n=2,\ell=1,m=0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi \cdot a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-r/2a_0} \cdot \cos \theta \\ \varphi_{n=2,\ell=1,m=-1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi \cdot a_0^3}} \cdot \frac{r}{a_0} \cdot e^{-r/2a_0} \cdot \sin \theta \cdot e^{-i\phi} \end{array} \right.$$

Annexe 2

Oscillateur harmonique

Cas unidimensionnel

On considère une particule de masse m se déplaçant dans un potentiel ne dépendant que de x et de la forme :

$$V(x) = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2$$

L'opérateur hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot X^2$$

H étant indépendant du temps (système conservatif), l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$H \cdot |\varphi\rangle = E \cdot |\varphi\rangle$$

En réalisation x , on a ;

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x^2 \right] \cdot \varphi(x) = E \cdot \varphi(x)$$

Remarques :

Les valeurs propres E de l'hamiltonien sont supérieures au minimum de $V(x)$, elles sont donc positives ici.

Les fonctions propres de H ont une parité définie car $V(x)$ est une fonction paire.

Le spectre d'énergie est discret car le mouvement classique de la particule s'effectue sur une région bornée de l'axe (Ox) quelle que soit son énergie totale.

Notations

On pose :

$$\begin{cases} \hat{X} = \sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot X \\ \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega}} \cdot P \end{cases}$$

Ce sont des opérateurs sans dimension vérifiant la relation de commutation :

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i$$

L'hamiltonien se met sous la forme :

$$H = \hbar \cdot \omega \cdot \hat{H}$$

avec $\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$.

On définit les opérateurs A et A^* par :

$$\begin{cases} A = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} + i \cdot \hat{P}) \\ A^* = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{X} - i \cdot \hat{P}) \end{cases}$$

En inversant :

$$\begin{cases} \hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A^* + A) \\ \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}(A^* - A) \end{cases}$$

\hat{X} et \hat{P} étant hermitiques, A et A* ne le sont pas mais sont adjoints l'un de l'autre.

On a les relations :

$$[A, A^*] = 1$$

$$A^* \cdot A = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - I)$$

$$\hat{H} = A \cdot A^* - \frac{1}{2}I = A^* \cdot A + \frac{1}{2}I$$

On introduit l'opérateur N tel que :

$$N = A^* \cdot A$$

Cet opérateur est hermitique ; $N^* = N$

$$\text{On a alors, } \hat{H} = N + \frac{1}{2}I$$

Les vecteurs propres de \hat{H} sont ainsi les vecteurs propres de N.

Relations de commutation

$$[N, A] = -A$$

$$[N, A^*] = A^*$$

L'équation aux valeurs propres de H peut se réécrire sous la forme :

$$N \cdot |\varphi\rangle = v \cdot |\varphi\rangle$$

Le vecteur propre $|\varphi\rangle$ de N est aussi vecteur propre de H mais avec la valeur propre E_v telle que ;

$$E_v = (v + 1/2) \cdot \hbar \cdot \omega$$

Détermination du spectre

1. Les valeurs propres v de l'opérateur N sont positives ou nulles.

2. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre (non nul) de N, de valeur propre v :

$$\text{Si } v = 0 \text{ alors } A \cdot |\varphi\rangle = 0.$$

Si $v > 0$ alors $A \cdot |\varphi\rangle$ est un vecteur propre non nul de N, de valeur propre $v - 1$.

3. Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur propre (non nul) de N, de valeur propre v :

$A^* \cdot |\varphi\rangle$ est toujours non nul.

$A^* \cdot |\varphi\rangle$ est vecteur propre de N, de valeur propre $v + 1$

4. D'après (1), on déduit que les valeurs propres v de N ne peuvent être que des entiers non-négatifs.

Conclusion :

L'énergie de l'oscillateur harmonique est quantifiée, les valeurs propres de l'hamiltonien sont de la forme ;

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \cdot \omega \quad \text{avec } n \in \mathbb{N}$$

Remarque :

Si on part d'un état propre $|\varphi\rangle$ de H correspondant à la valeur propre E_n , on passe par application de l'opérateur A à un vecteur propre de valeur propre E_{n-1} qui est égale à $E_n - \hbar \cdot \omega$. De même, l'opérateur A^* donne l'énergie propre E_{n+1} telle que $E_{n+1} = E_n + \hbar \cdot \omega$.

Ainsi, A est un **opérateur d'annihilation** et A^* est un **opérateur de création**, leur action étant de faire disparaître ou apparaître un quanton d'énergie $\hbar \cdot \omega$.

Dégénérescence des niveaux d'énergie

1. Le niveau fondamental est non-dégénéré :

En effet, les états propres associées à la valeur propre E_0 doivent vérifier ; $A \cdot |\varphi\rangle = 0$ c'est-à-dire

$$\text{par définition de A ; } \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[\sqrt{\frac{m \cdot \omega}{\hbar}} \cdot X + \frac{i}{\sqrt{m \cdot \hbar \cdot \omega}} \cdot P \right] \cdot |\varphi\rangle = 0.$$

En réalisation x, cette dernière équation devient ; $\left(\frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x + \frac{d}{dx} \right) \varphi(x) = 0$ où $\varphi(x) = \langle x | \varphi \rangle$.

La solution générale est donc ; $\varphi(x) = C \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2\right)$ où C est une constante.

Ainsi, toutes les fonctions propres sont proportionnelles entre elles et le niveau fondamental est non-dégénéré.

2. Tous les niveaux sont non-dégénérés :

Par récurrence ; si le niveau $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \cdot \hbar \cdot \omega$ n'est pas dégénéré alors il existe, à un facteur près, un seul vecteur $|\varphi_n\rangle$ tel que ; $N \cdot |\varphi_n\rangle = n \cdot |\varphi_n\rangle$. En considérant alors un vecteur propre $|\varphi_{n+1}\rangle$ correspondant à la valeur propre n+1, on a ; $N \cdot |\varphi_{n+1}\rangle = (n+1) \cdot |\varphi_{n+1}\rangle$ et $A \cdot |\varphi_{n+1}\rangle$ est vecteur propre de N avec la valeur propre n. Ainsi ; $A \cdot |\varphi_{n+1}\rangle = K \cdot |\varphi_n\rangle$ où K est une constante. En appliquant A^* , il vient ;

$$\begin{aligned} A^* \cdot A \cdot |\varphi_{n+1}\rangle &= K \cdot A^* \cdot |\varphi_n\rangle \\ \Leftrightarrow |\varphi_{n+1}\rangle &= \frac{K}{n+1} \cdot A^* \cdot |\varphi_n\rangle \end{aligned}$$

Les vecteurs propres $|\varphi_{n+1}\rangle$ sont donc proportionnels entre eux et la valeur propre n+1 n'est pas dégénérée tout comme le niveau E_{n+1} .

Conclusion :

Ce résultat étant vrai pour $n = 0$, toutes les valeurs propres de N et donc celles de H sont non-dégénérées.

Les états propres de l'hamiltonien

D'après ce qui précède, si l'on connaît le vecteur propre $|\varphi_{n-1}\rangle$ en lui imposant d'être normé, alors le vecteur normé $|\varphi_n\rangle$ s'écrit :

$$|\varphi_n\rangle = c_n \cdot A^* \cdot |\varphi_{n-1}\rangle$$

Et comme $\langle \varphi_n | \varphi_n \rangle = |c_n|^2 \cdot \langle \varphi_{n-1} | A \cdot A^* | \varphi_{n-1} \rangle = n \cdot |c_n|^2 = 1$, on peut choisir la convention de phase telle que ;

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

Conclusion :

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \cdot (A^*)^n \cdot |\varphi_0\rangle$$

Remarque :

H étant hermitique, les vecteurs $|\varphi_n\rangle$ correspondant à des valeurs de n différentes sont orthogonaux :

$$\langle \varphi_{n'} | \varphi_n \rangle = \delta_{nn'}$$

De plus, ils constituent une base de l'espace des états :

$$\sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = I$$

Action des opérateurs sur les états propres

L'action des opérateurs A et A* sur les vecteurs de base $\{ |\varphi_n\rangle \}$ est donnée par :

$$A^* \cdot |\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1} \cdot |\varphi_{n+1}\rangle$$

$$A \cdot |\varphi_n\rangle = \sqrt{n} \cdot |\varphi_{n-1}\rangle$$

Les équations adjointes sont :

$$\langle \varphi_n | \cdot A = \sqrt{n+1} \cdot \langle \varphi_{n+1} |$$

$$\langle \varphi_n | \cdot A^* = \sqrt{n} \cdot \langle \varphi_{n-1} |$$

De même, pour les opérateurs X et P :

$$X \cdot |\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m \cdot \omega}} \cdot [\sqrt{n+1} \cdot |\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} \cdot |\varphi_{n-1}\rangle]$$

$$P \cdot |\varphi_n\rangle = i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot [\sqrt{n+1} \cdot |\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n} \cdot |\varphi_{n-1}\rangle]$$

Les éléments de matrice des opérateurs A, A*, X et P dans la base $\{ |\varphi_n\rangle \}$ sont donc :

$$\langle \varphi_{n'} | A | \varphi_n \rangle = \sqrt{n} \cdot \delta_{n',n-1}$$

$$\langle \varphi_{n'} | A^* | \varphi_n \rangle = \sqrt{n+1} \cdot \delta_{n',n+1}$$

$$\langle \varphi_{n'} | X | \varphi_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m \cdot \omega}} \cdot [\sqrt{n+1} \cdot \delta_{n',n+1} + \sqrt{n} \cdot \delta_{n',n-1}]$$

$$\langle \varphi_{n'} | P | \varphi_n \rangle = i \cdot \sqrt{\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2}} \cdot [\sqrt{n+1} \cdot \delta_{n',n+1} - \sqrt{n} \cdot \delta_{n',n-1}]$$

Fonctions d'onde associées aux états stationnaires

On se place en réalisation x pour écrire les fonctions $\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle$ représentant les états propres de l'hamiltonien :

$$\varphi_0(x) = \langle x | \varphi_0 \rangle = \left(\frac{m \cdot \omega}{\pi \cdot \hbar} \right)^{1/4} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2 \right)$$

$$\varphi_n(x) = \langle x | \varphi_n \rangle = \left[\frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \left(\frac{\hbar}{m \cdot \omega} \right)^n \right]^{1/2} \cdot \left(\frac{m \cdot \omega}{\pi \cdot \hbar} \right)^{1/4} \cdot \left[\frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x - \frac{d}{dx} \right]^n \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2 \right)$$

Les premières fonctions d'onde sont :

$$\varphi_1(x) = \left[\frac{4}{\pi} \cdot \left(\frac{m \cdot \omega}{\hbar} \right)^3 \right]^{1/4} \cdot x \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2\right)$$

$$\varphi_2(x) = \left(\frac{m \cdot \omega}{4\pi \cdot \hbar} \right)^{1/4} \cdot \left[\frac{2m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2 - 1 \right] \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \cdot \frac{m \cdot \omega}{\hbar} \cdot x^2\right)$$

Discussion physique

Puisque X et P ne commutent pas avec H, les états propres de H ne sont pas ceux de X ou de P. Donc, si l'oscillateur harmonique est dans un état stationnaire, une mesure de X ou de P donnera un résultat quelconque (leur spectre étant l'axe des réels).

Les matrices de X et de P dans la base $\{ |\varphi_n\rangle \}$ n'ont pas, d'après les résultats précédents, d'éléments diagonaux :

$$\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle = 0$$

$$\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle = 0$$

Ainsi, les écarts quadratiques moyens ΔX et ΔP sont tels que :

$$(\Delta X)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle - \left(\langle \varphi_n | X | \varphi_n \rangle \right)^2 = \langle \varphi_n | X^2 | \varphi_n \rangle$$

$$(\Delta P)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle - \left(\langle \varphi_n | P | \varphi_n \rangle \right)^2 = \langle \varphi_n | P^2 | \varphi_n \rangle$$

Mais

$$X^2 = \frac{\hbar}{2m \cdot \omega} \cdot (A^{*2} + A \cdot A^* + A^* \cdot A + A^2)$$

$$P^2 = -\frac{m \cdot \hbar \cdot \omega}{2} \cdot (A^{*2} - A \cdot A^* - A^* \cdot A + A^2)$$

Les termes en A^2 et A^{*2} ne contribuent pas aux éléments de matrice diagonaux, puisque $A^2 \cdot |\varphi_n\rangle$ est proportionnel à $|\varphi_{n-2}\rangle$ et $A^{*2} \cdot |\varphi_n\rangle$ à $|\varphi_{n+2}\rangle$ qui sont orthogonaux à $|\varphi_n\rangle$. En revanche :

$$\langle \varphi_n | (A^* \cdot A + A \cdot A^*) | \varphi_n \rangle = \langle \varphi_n | (2A^* \cdot A + 1) | \varphi_n \rangle = 2n + 1$$

Conclusion :

$$(\Delta X)^2 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{\hbar}{m \cdot \omega}$$

$$(\Delta P)^2 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot m \cdot \hbar \cdot \omega$$

On retrouve l'inégalité de Heisenberg :

$$\Delta X \cdot \Delta P = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot \hbar \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (\text{avec } n \in \mathbb{N})$$

Remarques :

1. L'amplitude du mouvement classique x_M est telle que : $E = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot x_M^2$. Donc, si $E = E_n$, on

déduit que : $\Delta X = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot x_M$.

De même, si p_M est l'amplitude de l'oscillation de l'impulsion classique : $p_M = m \cdot \omega \cdot x_M$ et

$$\Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot p_M$$

2. L'énergie potentielle moyenne d'une particule dans l'état $|\varphi_n\rangle$ est :

$$\langle V(X) \rangle = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot \langle X^2 \rangle$$

Mais, comme $\langle X \rangle = 0$;

$$\langle V(X) \rangle = \frac{1}{2} m \cdot \omega^2 \cdot (\Delta X)^2 = \frac{E_n}{2}$$

De même, l'énergie cinétique moyenne de cette particule est :

$$\left\langle \frac{P^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{2m} \cdot (\Delta P)^2 = \frac{E_n}{2}$$

Un état stationnaire $|\varphi_n\rangle$ n'a aucun équivalent en mécanique classique car son énergie n'est pas nulle alors que les valeurs moyennes de X et de P le sont.

3. Si l'état d'un oscillateur harmonique à l'instant $t = 0$ s'écrit ;

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(0) \cdot |\varphi_n\rangle$$

alors son état à l'instant t sera ;

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(0) \cdot e^{-iE_n \cdot t/\hbar} \cdot |\varphi_n\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(0) \cdot e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t} \cdot |\varphi_n\rangle$$

La valeur moyenne d'une grandeur physique quelconque A est donc donnée en fonction du temps par :

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} c_m^*(0) \cdot c_n(0) \cdot A_{m,n} \cdot e^{i(m-n)\omega t}$$

avec $A_{m,n} = \langle \varphi_m | A | \varphi_n \rangle$.

Ainsi ;

$$\langle X \rangle(t) = \langle X \rangle(0) \cdot \cos \omega t + \frac{1}{m \cdot \omega} \cdot \langle P \rangle(0) \cdot \sin \omega t$$

$$\langle P \rangle(t) = \langle P \rangle(0) \cdot \cos \omega t - m \cdot \omega \cdot \langle X \rangle(0) \cdot \sin \omega t$$