Introduction

Le rôle de la théorie quantique est de décrire le comportement et de donner les lois d'évolution des constituants microscopiques de la matière. Nous avons amorcé le formalisme dans les cours précédents. Plus précisément, les phénomènes quantiques (qui - nous le verrons - sont essentiellements des phénomènes d'interférences) se manifestent pour des pbjets de petite taille Δx et/ou de petites impulsions Δp telles que

$$\Delta x \Delta p \approx h$$

où h représente la constante de Planck

$$h = 6,626.10^{-34}\ J.s^{-1}$$

La théorie quantique est donc essentielle en physique des particules, en physique nucléaire, atomique et moléculaire, et en physique du solide. Par ailleurs, comme les phénomènes macroscopiques résultent du comportement collectif des objets microscopiques, la théorie quantique a des conséquences indirectes à l'échelle macroscopique.

Système	Masse (kg)	Vitesse (m/s)	Ouverture a (m)	pa/h
Homme passant une porte	70	1	1	10^{34}
Hématie dans un capillaire	10^{-16}	10^{-1}	10^{-4}	10^{11}
Electron à travers une fente	9.10^{-31}	700	10^{-6}	1

Le changement radical entre la mécanique quantique et la mécanique classique est essentiellement qu'en mécanique classique une particule est un objet ponctuel décrit par un point $(\vec{x}, \vec{p})$ dans l'espace des phases (position-vitesse), alors qu'en mécanique quantique, une particule est un objet étendu décrit par une fonction d'onde $\psi(\vec{x})$. Une conséquence est la possibilité d'interférences. Le rôle de la mécanique est de donner les lois qui gouvernent l'évolution de ces objets. Ce sont les équations de Hamilton (ou de Newton) dans le cas classique et l'équation de Schrödinger dans le cas quantique.
La théorie quantique est valable pour des constituants élémentaires ou pour une assemblée de quelques constituants (atomes, molécules) tant qu'ils sont "isolés" de leur environnement. On ne peut parler de la fonction d'onde d'une balle ou même d'une poussière, qui sont des objets macroscopiques et non isolés. En principe, une théorie complète devrait pouvoir décrire toutes les échelles de la Nature. A l'heure actuelle, on ne sait pas rendre compte de façon totalement satisfaisante la théorie quantique avec l'aspect classique de la nature à l'échelle macroscopique. Cela est pourtant discuté depuis longtemps.

Mécanique	Classique	Quantique
Non relativiste	Mécanique de Newton (1687)	Mécanique quantique (1925)
Relativiste	Relativité restreinte (1905)	Théorie quantique des champs(1930)
Relativité générale	Relativité générale (1916	Théorie des cordes ??

Chapter 1

Une particule quantique sans spin, à une dimension

Dans ce chapitre, il y a beaucoup de rappels des cours précédents, mais avec une présentation un peu plus formelle. Nous allons étudier une particule se déplaçant selon une seule dimension (notée x). Il s'agit d'une particule sans degré de liberté interne (sans spin).
Dans les premières sections, on suppose que la particule quantique est isolée de son environnement. Précisément, cela signifie que que son mouvement n'influence pas la nature (i.e. les particules environnantes). En revanche, on accepte que son environnement exerce sur elle une certaine force résultate décrite par une fonction énergie potentielle $V(x)$ d'après la relation

$$F(x) = -\frac{dV}{dx}$$

La force F peut même dépendre du temps, mais on la supposera indépendante du temps dans ce chapitre.
Avec ces hypothèses, la théorie quantique nous permet de décrire l'état dynamique de la particule par une fonction d'onde.
Bien sûr, pour être valables en pratique, ces hypothèses nécessitent des approximations.
Il est important de noter que le terme "particule" sera employé mais que c'est un terme trompeur, puisqu'il faut imaginer une onde qui est un objet étendu et non ponctuel.
Pour fixer les idées, il peut s'agir d'un atome vibrant au coeur d'un matériau ou au sein d'une molécule, soumis aux forces des atomes voisins. Il peut aussi s'agir d'un électron libre se déplaçant dans un fil conducteur (en oubliant le spin).

1.1 Espace des états : les fonctions d'ondes

1.1.1 Espace vectoriel des fonctions d'ondes

Une fonction d'onde permetde décrire l'état spatial d'une particule. C'est une fonction à valeurs complexes. Si l'espace est à une dimension (paramétré par $x \in \mathbb{R}$, une fonction d'onde est

$$\psi : x \mapsto \psi(x) \in \mathbb{C}$$

L'ensemble des fonction d'ondes noté $\mathcal{H}$ forme un espace vectoriel complexe car si $\psi_1, \psi_2 \in \mathbb{C}$ alors la somme et le produit par une constante complexe appartiennent aussi à cet ensemble [1]

$$\varphi = (\psi_1 + \psi_2) \in \mathcal{H}$$

$$\phi = \lambda\,\psi_1 \in \mathcal{H}$$

Il s'agit d'un espèce vectoriel de dimension infinie ; cela est lié au fait qu'une fonction ψ est déterminée par les valeurs $\psi(x)$ prises en une infinité de valeurs de x différentes.
Dans la notation de Dirac, on convient de représenter une fonction d'onde par le symbole $|\psi\rangle$ et appelé *ket*. Les deux écritures précédentes deviennent alors

$$|\varphi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$$

$$|\phi\rangle = \lambda\,|\psi_1\rangle$$

Il n'y a rien de nouveau dans cette botation, sauf peut-être l'image que l'on se fait d'une fonction d'onde. L'image traditionnelle est une fonction $x \mapsto f(x)$ représentée par son graphe. Dans la notation de Dirac, on imagine plutôt un point de l'espace vectoriel $\mathcal{H}$ - qui est l'extrémité d'une flèche -. Cette image vectorielle suggérée par Dirac a des avantages certains, mais notre imagination ne permet pas de dépasser la dimension trosi (l'espace) alors que $\mathcal{H}$ est de dimension infinie !

1.1.2 Exemples importants

Voici deux exemples importants de fonctions d'ondes à une dimension. On se contente de donner ici leur expression et représentation. Leur interprétation physique et mathématique sera donnée plus loin.

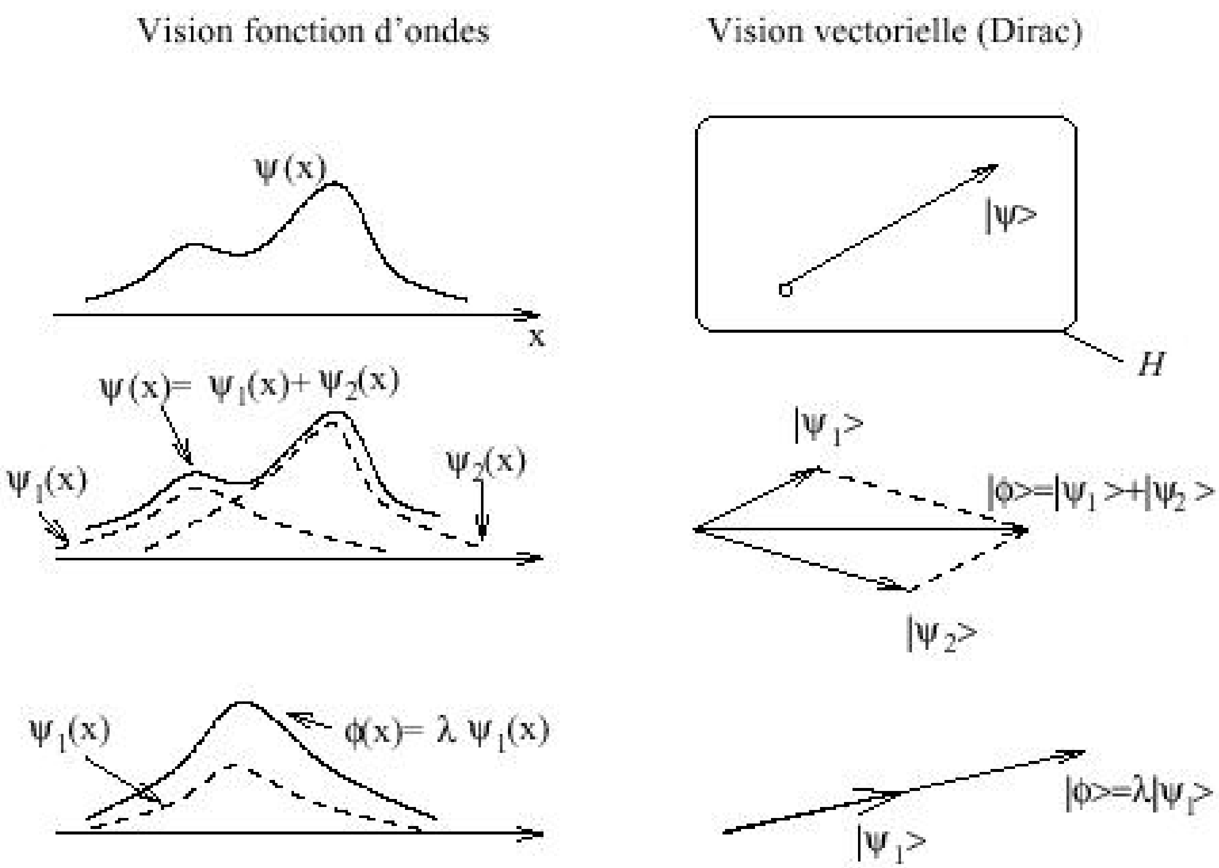
Les ondes planes

L'onde plane d'impulsion $p \in \mathbb{R}$ peut se mettre sous la forme

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,exp\left(i\,\frac{px}{\hbar}\right)$$

où $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$ est la constante de Planck réduite. L'intérêt du préfacteur de l'exponentielle sera montré ultérieurement avec la relation de fermeture. En notation de Dirac, nous écrirons $|p\rangle$.

[1] En mathématiques, un groupe est un ensemble G muni d'une loi interne notée "." telle que $(G, G) \mapsto G$ qui est associative ($\forall a, b, c\,,\ a.(b.c) = (a.b).c$) avec un élément appelé identité noté "1" tel que $g.1 = 1.g = g$, $\forall g \in G$ et un inverse noté g^{inv} tel que $\forall g \in G,\ g.g^{inv} = g^{inv}.g = 1$. Un groupe est dit commutatif si $\forall g,\ h \in G\ g.h = h.g$; dans ce cas, on a coutume de noter la loi interne "." par "+". Un espace vectoriel complexe E est un ensemble muni d'une loi interne notée "+", telle que (E,+) est un groupe commutatif et muni d'une loi externe notée $(\mathbb{C}, E) \to E$ qui est distributive par rapport à la loi "+" : $\lambda.(v + w) = \lambda.v + \lambda.w$. On parle d'espace vectoriel réel si la loi externe vérifie $(\mathbb{R}, E) \to E$.



Paquet d'onde gaussien

Le paquet d'onde gaussien de position moyenne $x_o \in \mathbb{R}$, d'impulsion moyenne $p_o \in \mathbb{R}$ et de largeur $\sigma \in \mathbb{R}$ peut se mettre sous la forme

$$\psi_{x_o,p_o,\sigma}(x) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/4}}\, exp\left(i\,\frac{p_o x}{\hbar}\right)\, exp\left(-\frac{(x-x_o)^2}{2\sigma^2}\right)$$

soit $|x_o, p_o, \sigma\rangle$ en notation de Dirac. Lorsque la largeur $\sigma \to \infty$, le paquet d'onde gaussien tend vers une onde plane d'impulsion p_o, à condition de modifier le préfacteur.

1.1.3 Le produit scalaire

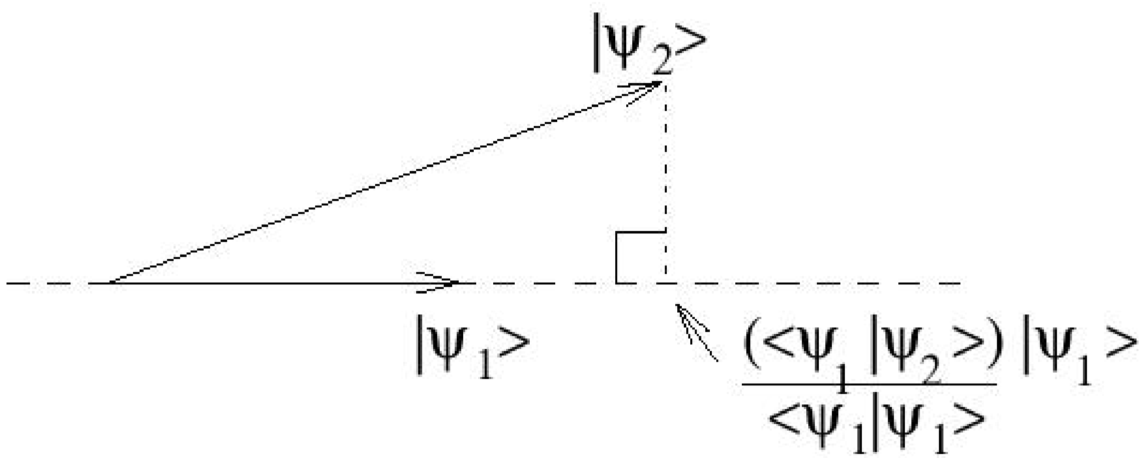
Afin de pouvoir distinguer de manière quantitative deux fonctions d'ondes différentes, on introduit le produit scalaire.

Le produit scalaire hermitien de deux fonctions d'ondes $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ est le nombre complexe noté $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ défini par [2]

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \int_{\mathbb{R}} \overline{\psi_1}(x)\,\psi_2(x)\,dx$$

[2] Par définition, un produit scalaire hermitien $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ sur un espace vectoriel $\mathcal{H}$ doit vérifier les propriétés suivantes : $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \overline{\langle\psi_2|\psi_1\rangle}$; $\langle\psi_1|\lambda\psi + \mu\varphi\rangle = \lambda\langle\psi_1|\psi\rangle + \mu\langle\psi_1|\varphi\rangle$; $\langle\psi|\psi\rangle \geqslant 0$. Par déduction, on a également l'antilinéarité à gauche : $\langle\lambda\psi + \mu\varphi|\phi\rangle = \overline{\lambda}\langle\psi|\varphi\rangle + \overline{\mu}\langle\varphi|\phi\rangle$.

en notant $\overline{\psi_1}(x)$ le nombre complexe conjugué de $\psi_1(x)$.
La notation de Dirac $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ pour le produit scalaire fait clairement intervenir les deux vecteurs $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$, mais aussi la notation *bra* $\langle\psi_1|$ qui correspond au fait que l'on a pris le conjugué de $\psi_1(x)$.
Comme en géométrie euclidienne, on peut interpréter le produit scalaire $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ comme la composante du vecteur $|\psi_2\rangle$ projetée orthogonalement sur le vecteur $|\psi_1\rangle$. Intuitivement, il renseigne si la fonction $\psi_2(x)$ est plus ou moins "composée" de la fonction $\psi_1(x)$.



Les deux fonctions sont orthogonales si $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. Comme en géométrie euclidienne, $\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle$ définit la norme au carré de la fonction ψ. En terme de fonction, cela donne [3]

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2\, dx > 0$$

et donc la norme au carré $\|\ \psi|^2$ est la surface sous la courbe positive $|\psi(x)|^2$.
On dit qu'un vecteur est normalisé si $\|\psi\| = 1$. En terme vectoriel, cela signifie que le vecteur a une longueur égale à 1 ; en terme de fonction, cela signifie que la surface sous la courbe $|\psi(x)|^2$ est égale à 1. Cette notion sera essentielle par la suite pour interpréter $|\psi(x)|^2$ comme une densité de probabilité de présence lors de la détection de la particule.
Il faut remarquer qu'il y a des fonctions dont la norme est infinie. Par exemple, pour une onde plane $\langle\psi_p|\psi_p\rangle = \int_{\mathbb{R}} (1/h)\ dx = \infty$. Le sous-espace des fonctions pour lesquelles la norme est finie est noté $\mathcal{H}$ et appelé **espace de Hilbert** des fonctions d'ondes (ou espace des fonctions de carré sommable). D'un point de vue physique, cette restriction sera importante pour parler de la probabilité de présence de la particule lors de sa détection, et d'un point de vue

[3]Comme $\|\psi\|^2 \in \mathbb{R}$, cette équation montre que $|\psi(x)|^2 dx$ n'a pas d'unité et donc que $\psi(x)$ a l'unité de "$1/\sqrt{longueur}$".

mathématique, c'est aussi important car l'espace de Hilbert noté $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$ possède des propriétés très intéressantes notamment vis à vis de la transformation de Fourier.

Quelques remarques importantes
Si $\lambda \in \mathbb{C}$,

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}$$
$$\langle \lambda \psi_1 | \psi_2 \rangle = \overline{\lambda} \, \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$$
$$\langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_3 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_3 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle$$

On rencontre d'autres espaces de Hilbert, notamment

- pour décrire une particule confinée dans le segment $x \in [0; L]$: c'est l'espace des fonctions $\psi(x)$ de carré sommable s'annumant en dehors de ce segment $\mathcal{H} = L^2([0; L])$
- pour décrire une particule confinée sur un cercle S^1 (par exemple, un électron confiné sur un petit fil conducteur circulaire ou fil quantique) : c'est l'espace des fonctions $\psi(\theta)$ de carré sommable et périodiques, où θ représente la position angulaire sur le fil ; cet espace est noté $\mathcal{H} = L^2(S^1)$.

1.1.4 Vecteur dual, espace dual