

La science quantique: Une vision singulière

Résumé: photon

P.A. Besse

Paramètres d'une onde:

$$\begin{pmatrix} \omega \\ \vec{K} \end{pmatrix}$$

Fréquence de l'onde

Vecteur d'onde

«quadri-vecteur»



Nobel 1918

Relation de Planck

$$\begin{pmatrix} E \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} \omega \\ \vec{K} \end{pmatrix}$$

Paramètres d'une particule:

$$\begin{pmatrix} E \\ \vec{P} \end{pmatrix}$$

Energie de la particule

Impulsion de la particule

«quadri-vecteur»



Relation de De Broglie



Nobel 1929

Résumé pour les photons

Amplitude:

$$\mu(\vec{x}, t)$$

$$\begin{aligned} &E_x, E_y, E_z \\ &D_x, D_y, D_z \\ \mu = &B_x, B_y, B_z \\ &H_x, H_y, H_z \\ &\varphi, A_x, A_y, A_z \end{aligned}$$

Relation de dispersion:

$$E^2 = c^2 \cdot (P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)$$

Equation d'onde de Maxwell:

$$\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} \mu = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \mu$$

Paramètres onde-particule:

$$\begin{pmatrix} E \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} \omega \\ \vec{K} \end{pmatrix}$$

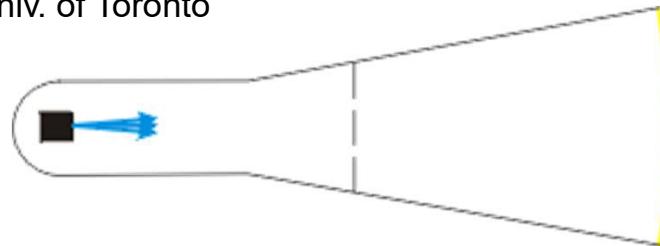
La science quantique Une vision singulière

II) L'électron

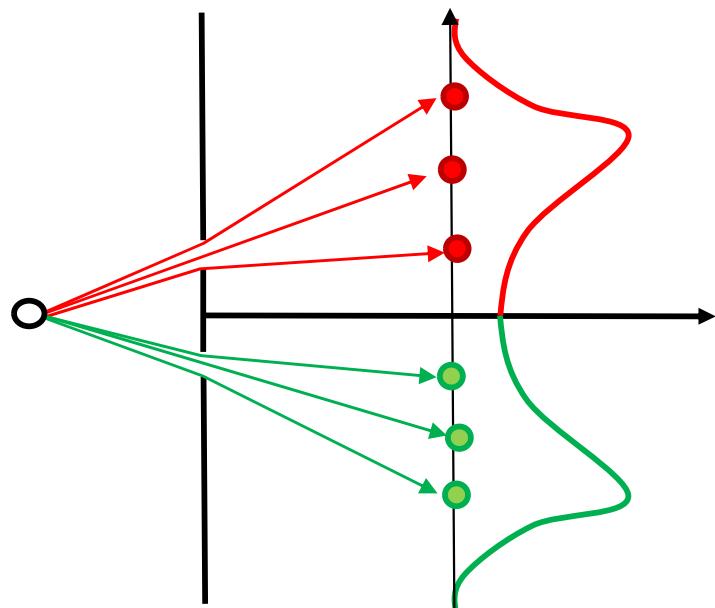
P.A. Besse

Interférences d'électrons: (fentes de Young électroniques)

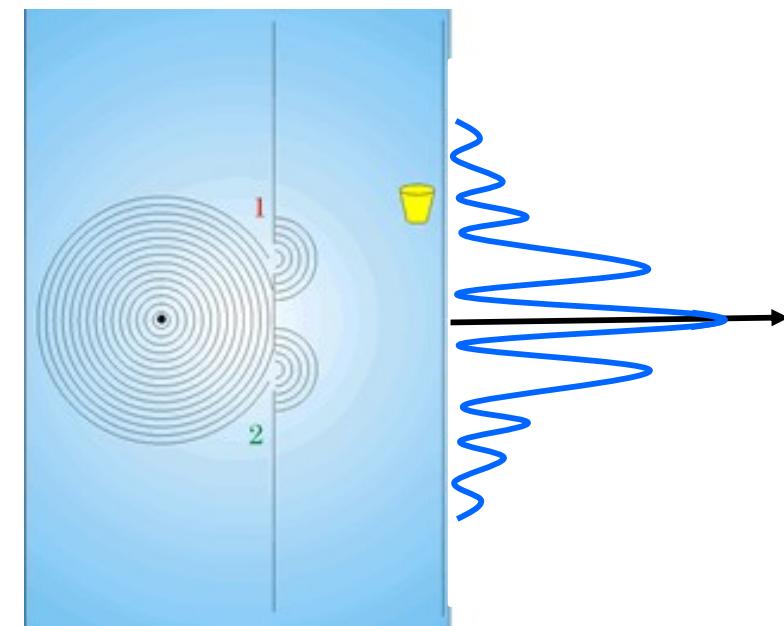
Inspiré de D. M. Harrison, Univ. of Toronto



Hypothèse «particules»



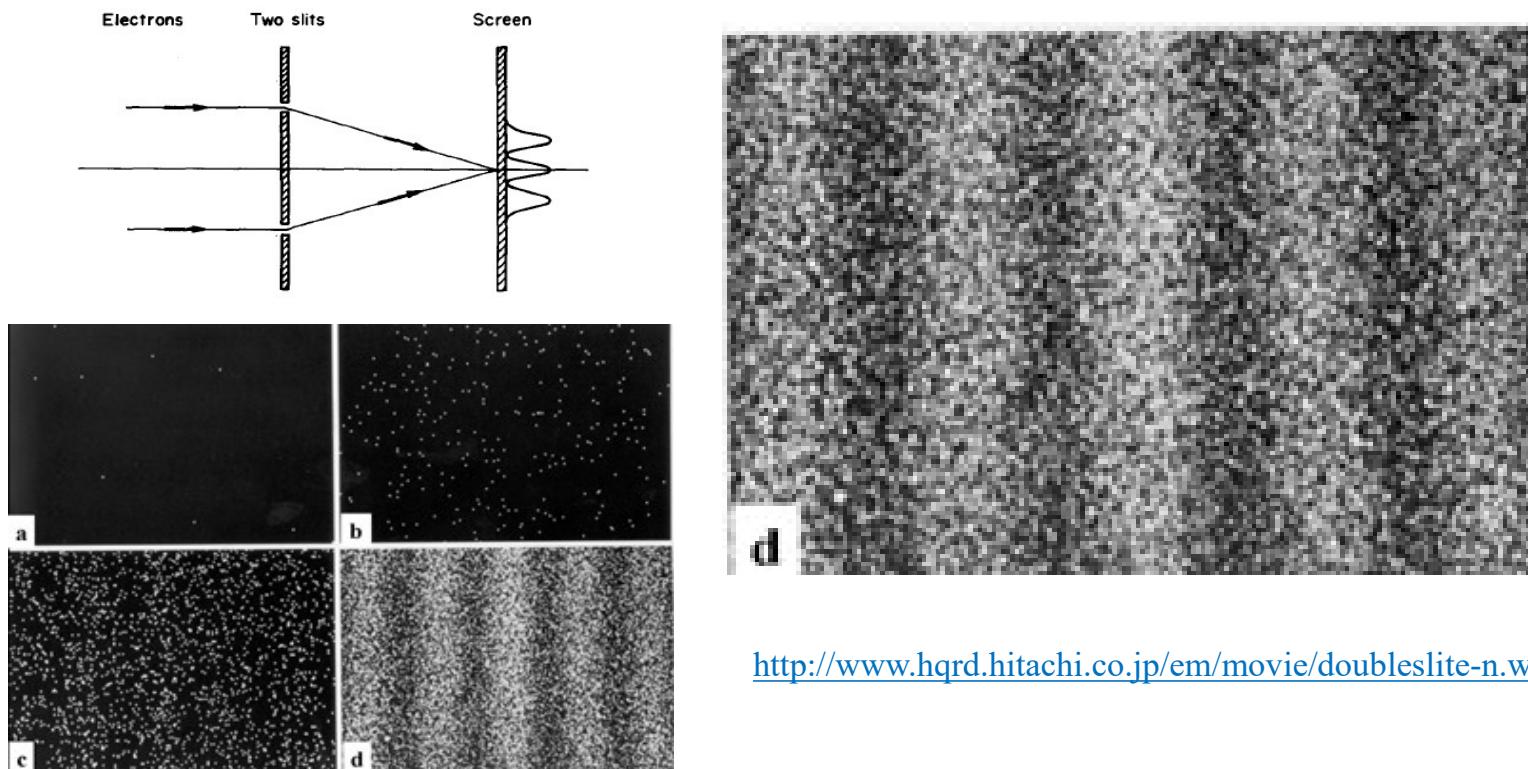
Hypothèse «ondes»



Particule / Onde

Motivation: interférences d'électrons

Double-slit experiment with single electron



<http://www.hqrd.hitachi.co.jp/em/movie/doubleslite-n.wmv>

A. Tonomura, Am. J. Phys. 57 (2), 1989, pp. 117-120

Interférences → l'électron se comporte aussi comme une onde

Fonctions d'onde:

$$|\psi(\vec{x}, t)\rangle$$

Exemple: fonctions harmoniques (\sin, \cos, \dots)

$$|\psi(\vec{x}, t)\rangle \approx e^{i(\vec{K}\vec{x} - \omega t)}$$

Fonction d'onde:

$$|\psi(\vec{x}, t)\rangle \approx e^{i(\vec{K}\vec{x} - \omega t)}$$

Opérateur d'impulsion:

$$\frac{\partial}{\partial x} |\psi(\vec{x}, t)\rangle = i k_x \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle = i \frac{p_x}{\hbar} \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle \quad \Rightarrow$$

$$\vec{P} \equiv -i\hbar \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} \dots, \quad \frac{\partial}{\partial y} \dots, \quad \frac{\partial}{\partial z} \dots \right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} |\psi(\vec{x}, t)\rangle = -k_x^2 \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle \quad \Rightarrow$$

$$|\vec{P}|^2 \equiv -\hbar^2 \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \dots$$

Fonction d'onde:

$$|\psi(\vec{x}, t)\rangle \approx e^{i(\vec{K}\vec{x} - \omega t)}$$

Opérateur d'énergie:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{x}, t)\rangle = -i\omega \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle = -i\frac{E}{\hbar} \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle \quad \Longrightarrow$$

$$E \equiv i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \dots$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} |\psi(\vec{x}, t)\rangle = -\omega^2 \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle = -\frac{E^2}{\hbar^2} \cdot |\psi(\vec{x}, t)\rangle \quad \Longrightarrow$$

$$E^2 \equiv -\hbar^2 \cdot \frac{\partial^2}{\partial t^2} \dots$$

Equation de Schroedinger (1)

Expression «classique» de l'énergie d'une particule «massique»:

$$E = E_{kin} + E_{pot} = \frac{|\vec{P}|^2}{2m} + V$$

Opérateur quantique:

$$|\vec{P}|^2 \equiv -\hbar^2 \cdot \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \dots$$



Hamiltonien quantique H:

$$H = \frac{|\vec{P}|^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V$$

Equation de Schroedinger (2)

Hamiltonien quantique H:

$$H = \frac{|\vec{P}|^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V = E$$

Opérateur quantique:

$$E \equiv i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \dots$$

Equation de Schroedinger:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \right] \cdot |\psi\rangle = H \cdot |\psi\rangle$$



Nobel 1933

photons

amplitude

$$\mu(x,t) = \mu_1(x,t) + \mu_2(x,t)$$

intensité

$$I(x,t) \equiv |\mu|^2 = |\mu_1|^2 + |\mu_2|^2 + 2 \cdot |\mu_1| \cdot |\mu_2| \cdot \cos(\Delta\varphi)$$

électrons

Fonction d'onde

$$\psi(x,t) = \psi_1(x,t) + \psi_2(x,t)$$

Probabilité de trouver un électron

$$|\psi(x,t)|^2 \equiv \psi^* \cdot \psi = |\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + 2 \cdot |\psi_1| \cdot |\psi_2| \cdot \cos(\Delta\varphi)$$

Résumé pour les électrons

Fonction d'onde:

$$|\psi(\vec{x}, t)\rangle$$

Relation de dispersion:

$$H \equiv E = \left[\frac{(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)}{2m} + V(\vec{x}, t) \right]$$

Equation de Schroedinger:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H \cdot |\psi\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V \right] \cdot |\psi\rangle$$

Paramètres onde-particule:

$$\begin{pmatrix} E \\ \vec{P} \end{pmatrix} = \hbar \cdot \begin{pmatrix} \omega \\ \vec{K} \end{pmatrix}$$

Exemples d'Hamiltoniens

Energie cinétique: $H_{cin} = \frac{1}{2m} P^2$

Energie potentielle: $H_{pot} = (-q) \cdot \varphi$

Energie électrique: $H_E = \frac{\epsilon_0}{2} E^2$

Energie capacitive: $H_C = \frac{1}{2C} Q^2$

Energie d'interaction électromagnétique: $H_{\text{inter}} = -\vec{m} \cdot \vec{B}$

Moment magnétique

Energie potentielle d'un ressort: $H_\kappa = \frac{\kappa}{2} X^2$

Energie potentielle de Coulomb

$$H_q = -\left(\frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0}\right) \cdot \frac{1}{r}$$

Energie magnétique: $H_B = \frac{1}{2\mu_0} B^2$

Energie inductive

$$H_L = \frac{1}{2L} \phi^2$$

Flux magnétique

Interactions spin-spin: $H_J \cong -\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2$

Interactions courant-champ magnétique:

$$H_A \cong -\vec{j} \cdot \vec{A}$$

...

Equation de Schroedinger

Solutions:

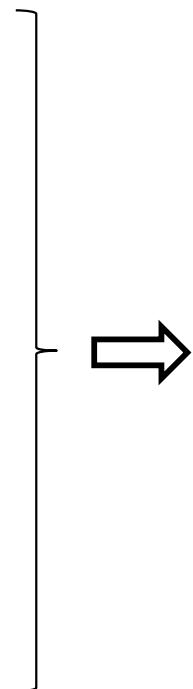
- 1) Propagateur
- 2) Modes propres

1) Equation de Schroedinger: solution par «propagateur»

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H \cdot |\psi\rangle$$

avec

$$|\psi_0\rangle = |\psi(x, 0)\rangle$$



Opérateur
Hamiltonien

$$|\psi(x, t)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar} \cdot t} \cdot |\psi_0\rangle$$

Fonction d'onde
à l'origine (t=0)

propagateur

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t) = \alpha \cdot f(t) \Rightarrow f(t) = f(0) \cdot e^{\alpha \cdot t}$$

2) Equation de Schroedinger: solution par «modes propres» et produit scalaire

A) Développer la fonction d'onde dans la base orthogonale des vecteurs propres de H

$$|\psi_0\rangle = |\psi(x, 0)\rangle = \sum_n \alpha_n \cdot |\varphi_n(x)\rangle \quad \text{avec} \quad \alpha_n = \langle \varphi_n(x) | |\psi_0(x)\rangle$$

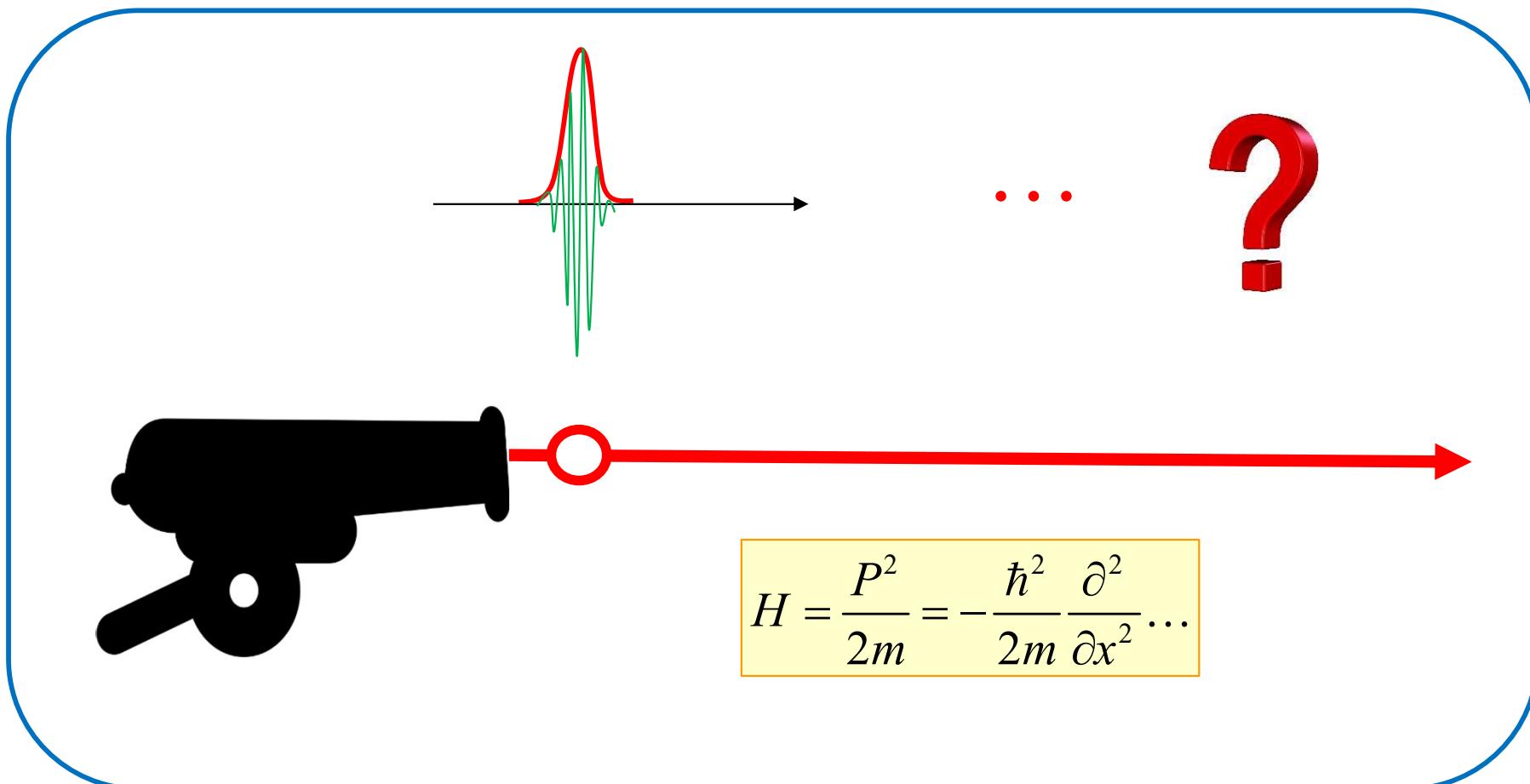
Spectre par produit scalaire

B) Laisser propager chaque mode propre avec sa valeur propre E_n

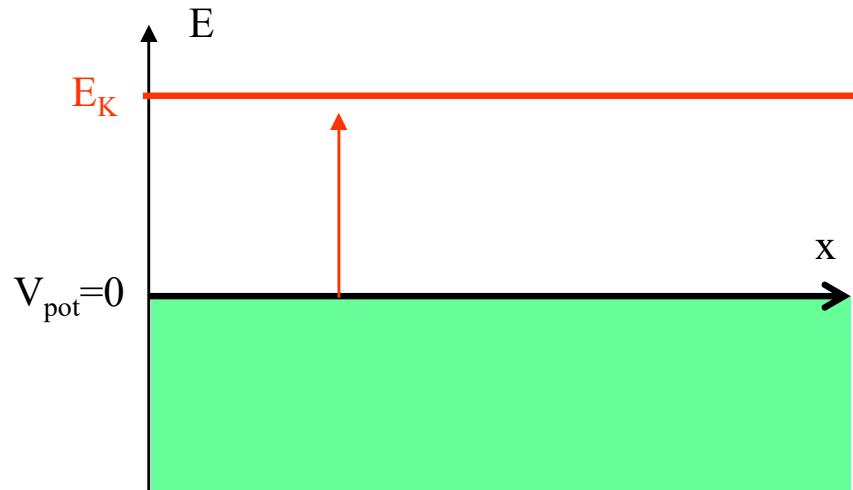
Dans la base orthogonale de ses vecteurs propres, l'Hamiltonien est diagonal

$$|\psi(x, t)\rangle = \sum_n \alpha_n \cdot e^{-i\frac{E_n}{\hbar} \cdot t} \cdot |\varphi_n(x)\rangle$$

Exemple:
Propagation d'un électron dans le vide



Modes propres dans le vide ($V_{\text{pot}}=0$)



Modes propres de l'Hamiltonien

$$H = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \dots$$

$$\varphi_K(x, 0) = A \cdot e^{iK \cdot x}$$

Modes de Fourier

$$\Rightarrow H \cdot |\varphi_K\rangle = \left(\frac{\hbar^2}{2m} K^2 \right) \cdot |\varphi_K\rangle \equiv E_K \cdot |\varphi_K\rangle$$

Valeur propre

Mode propre

Propagation selon l'équation de Schroedinger:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\varphi_K\rangle = E_K \cdot |\varphi_K\rangle \Rightarrow \varphi_K(x, t) = \varphi_K(x, 0) \cdot e^{\frac{E_K}{i\hbar} \cdot t}$$

$$\varphi_K(x, t) = A_K \cdot e^{iK \cdot x} \cdot e^{-i\omega_K t}$$

avec

$$\omega_K \equiv \left(\frac{\hbar}{2m} K^2 \right)$$

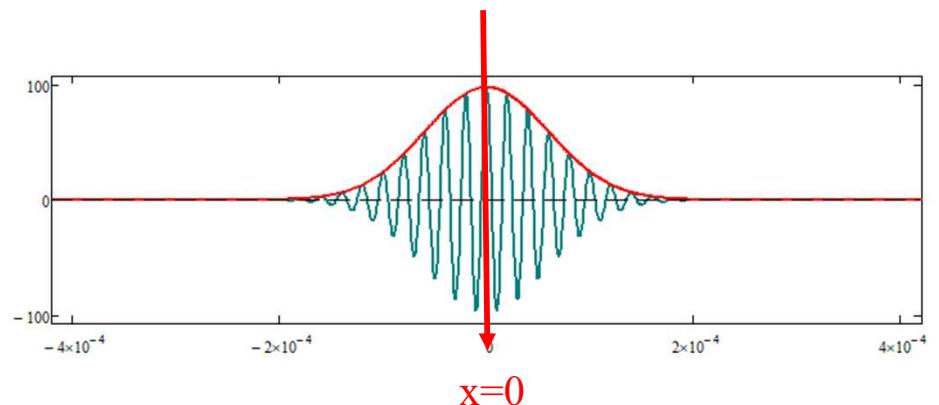
Fréquence pour
l'évolution
du mode propre

Bit électronique

Amplitude en t=0

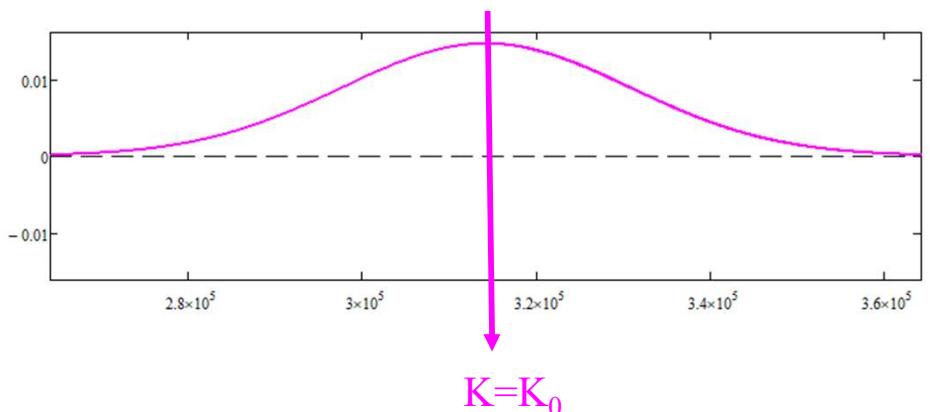
$$|\psi_0(x)\rangle = \left(\frac{1}{\pi \cdot \sigma_0^2} \right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{x^2}{2\sigma_0^2}} \cdot e^{iK_0 x}$$

enveloppe
Porteuse



Transformée de Fourier en t=0

$$|\tilde{\psi}_0(K)\rangle = (4\pi\sigma_0^2)^{1/4} \cdot e^{-\frac{\sigma_0^2(K-K_0)^2}{2}}$$



Variance en x: $\sigma_x^2 = \sigma_0^2$

Variance en K: $\sigma_K^2 = 1 / \sigma_0^2$

Propagation dans l'espace de Fourier

$$|\tilde{\psi}(K, t)\rangle = \left(4\pi\sigma_0^2\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{\sigma_0^2(K-K_0)^2}{2}} \cdot e^{-i\omega_K t}$$

Propagation
 $\omega_K = \frac{\hbar}{2m} \cdot K^2$

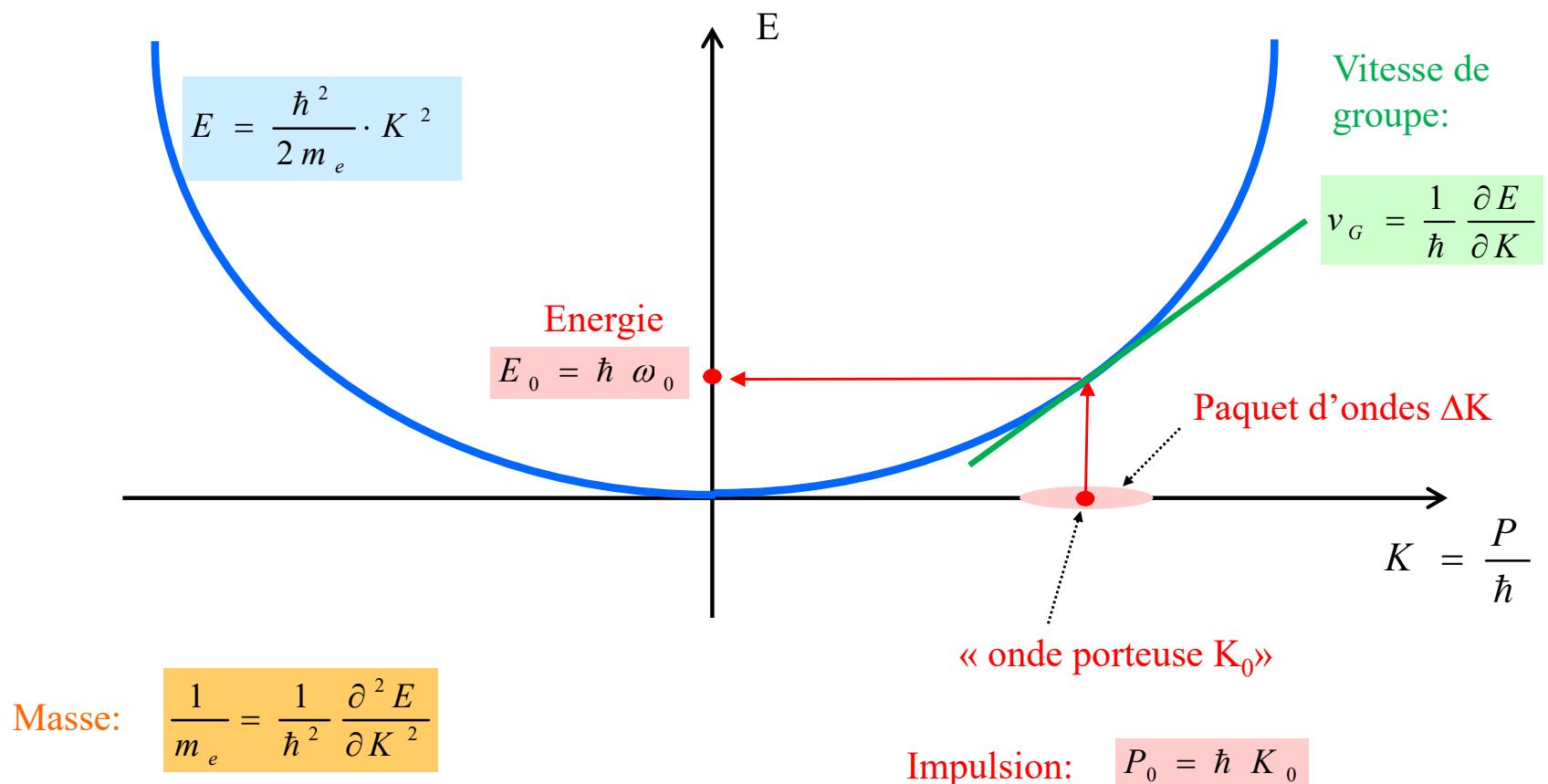
Retour dans l'espace x par transformée de Fourier inverse:

$$|\psi(x, t)\rangle \approx \left(\frac{1}{\pi \cdot \sigma^2}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{(x-v_G t)^2}{2\sigma^2}}$$

Vitesse de groupe: $v_G \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial K} \Big|_{K=K_0} = \frac{\hbar K_0}{m}$

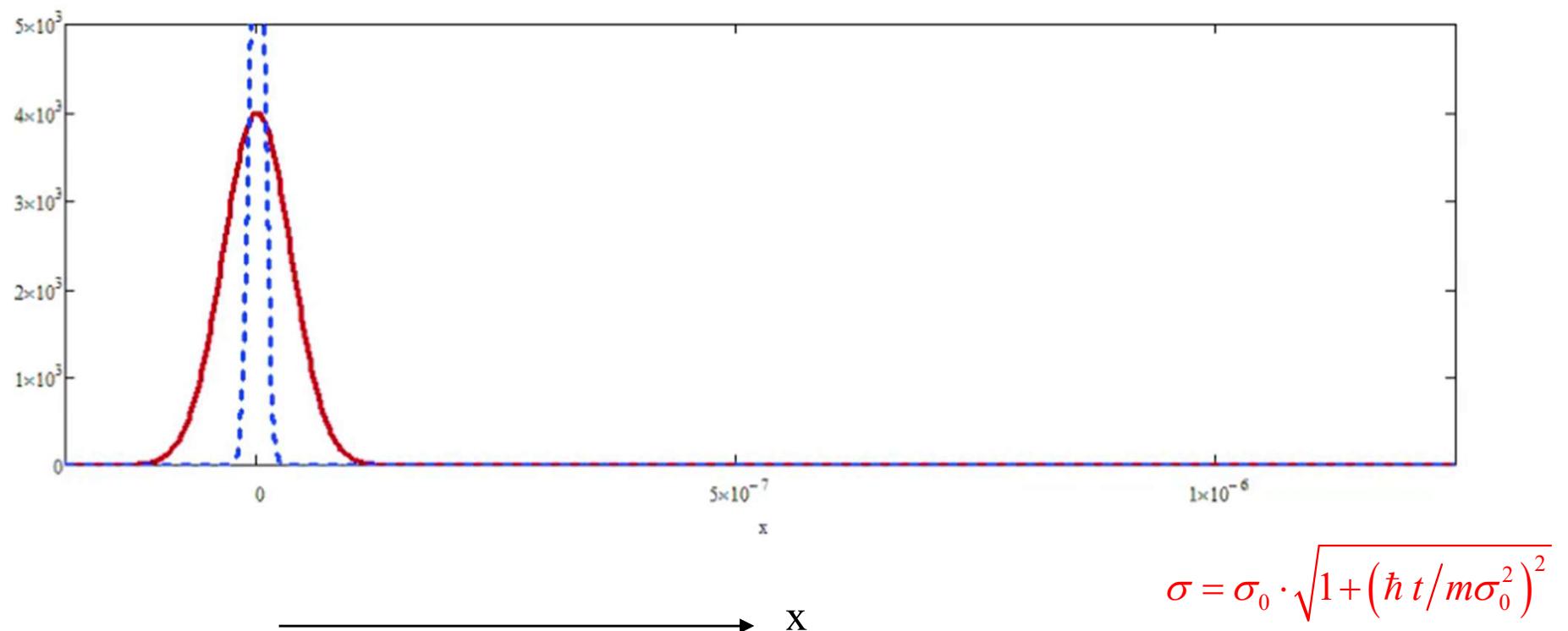
Dispersion: $\sigma = \sigma_0 \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m\sigma_0^2}\right)^2}$

Relation de dispersion dans le vide

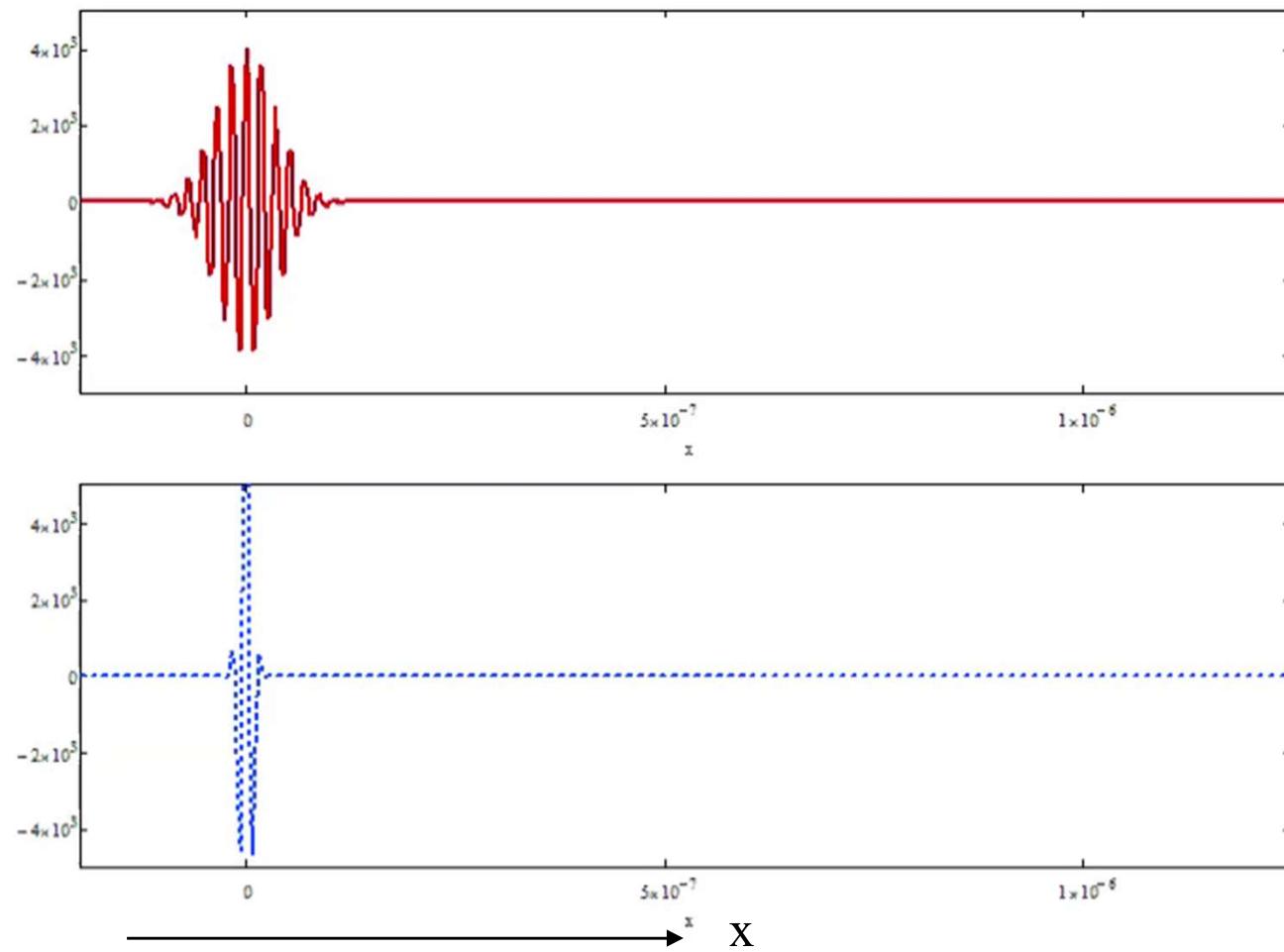


Exemple (1)

Propagation deux particules de localisation σ_0 différentes:

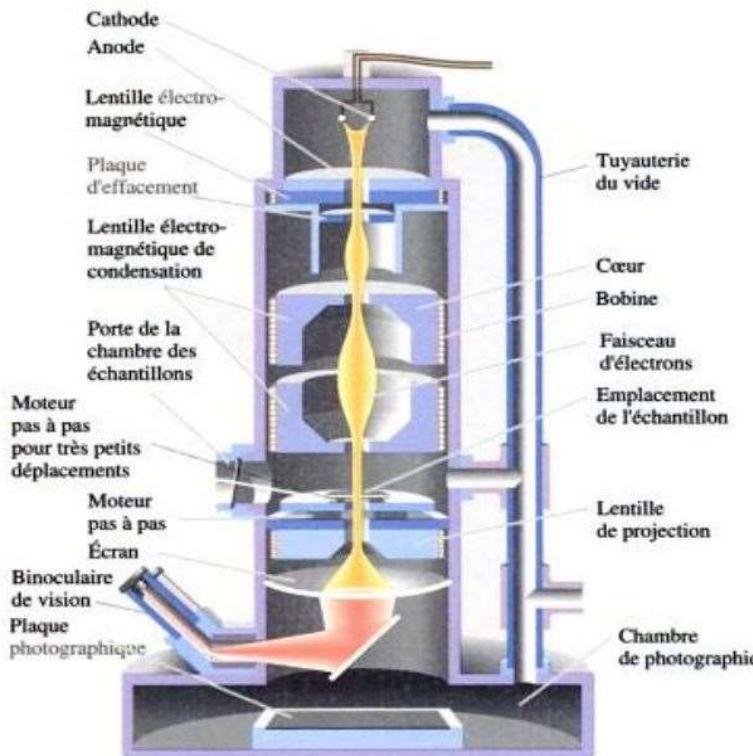


Vitesse de phase et vitesse de groupe



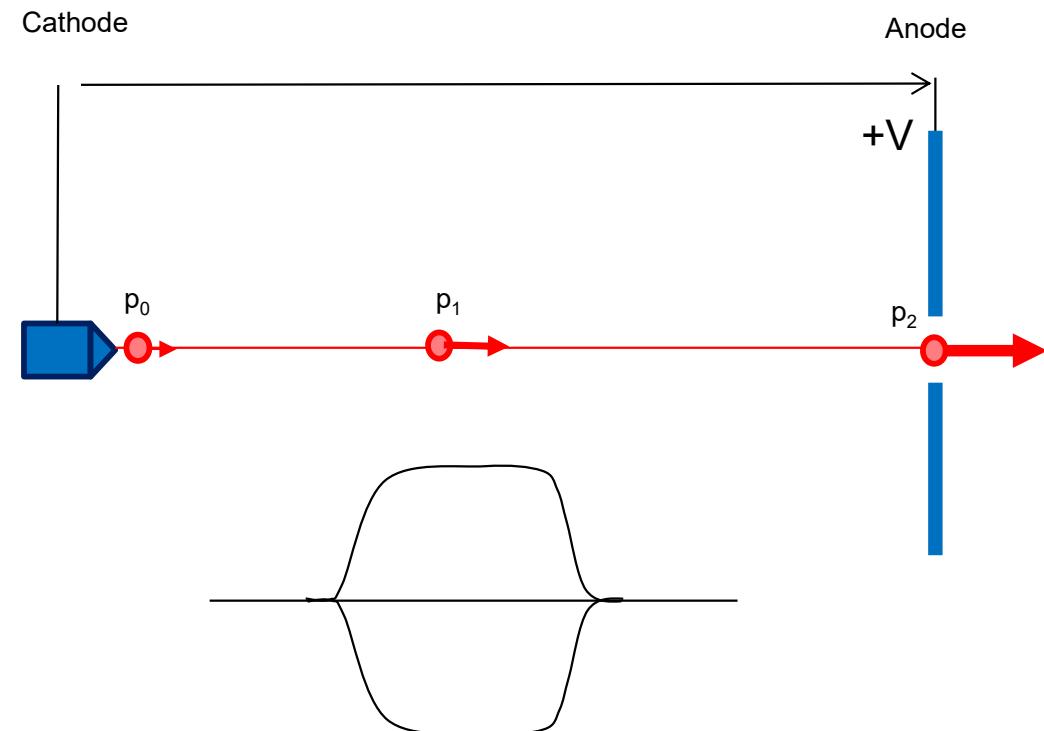
Exemple: microscope électronique

TEM principle

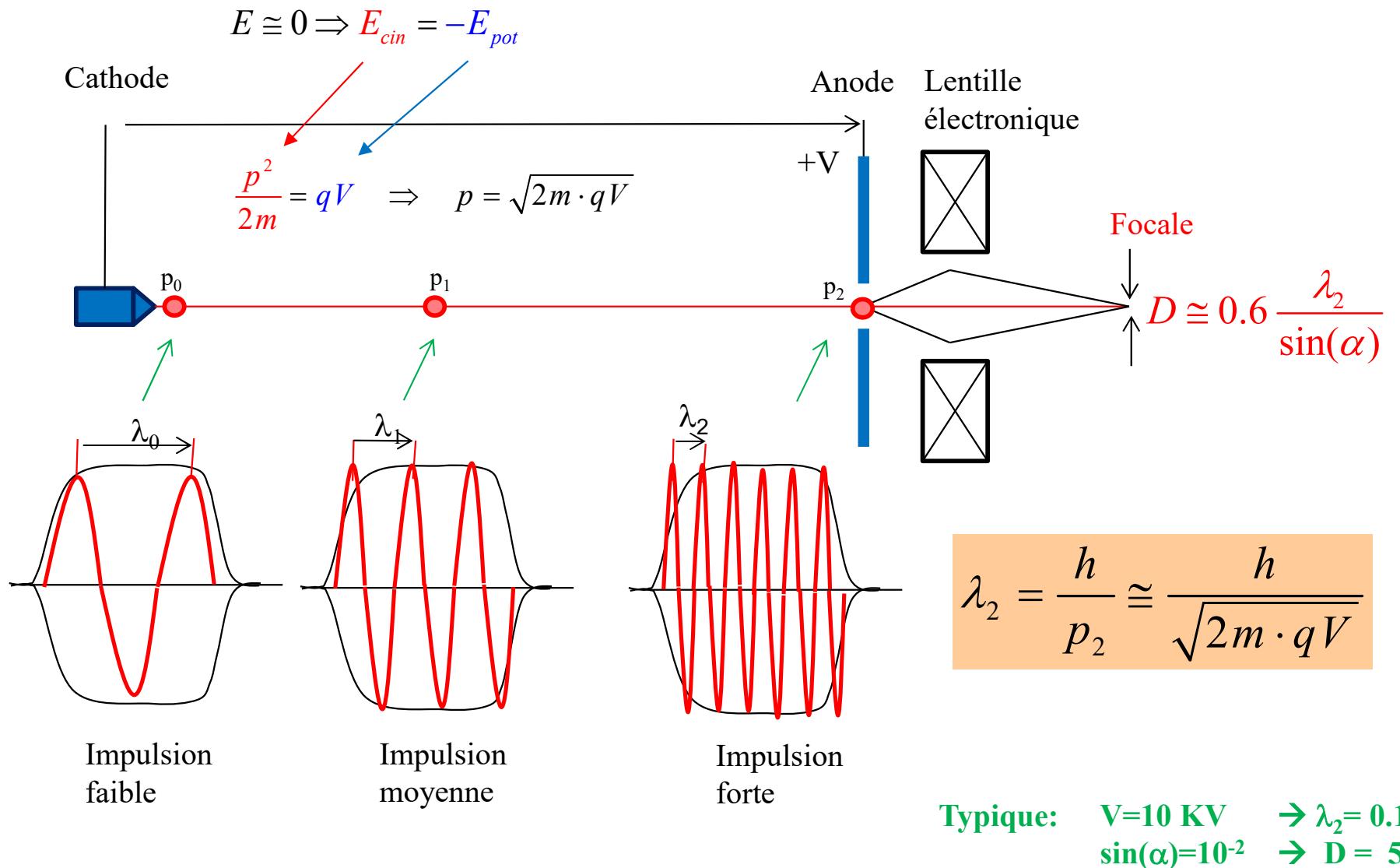


Eugene Hecht, « Physique », p. 1171

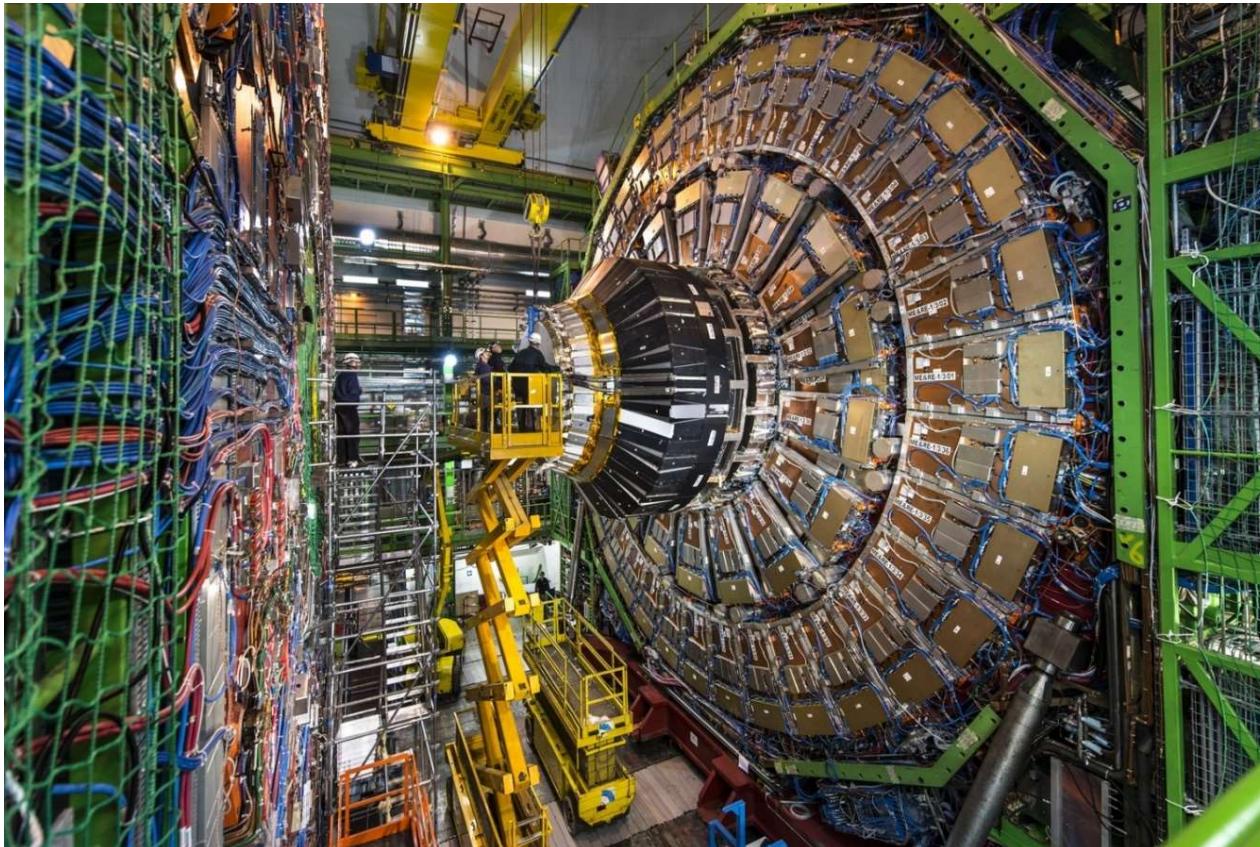
Canon à électrons simplifié



Microscope électronique: canon à électrons

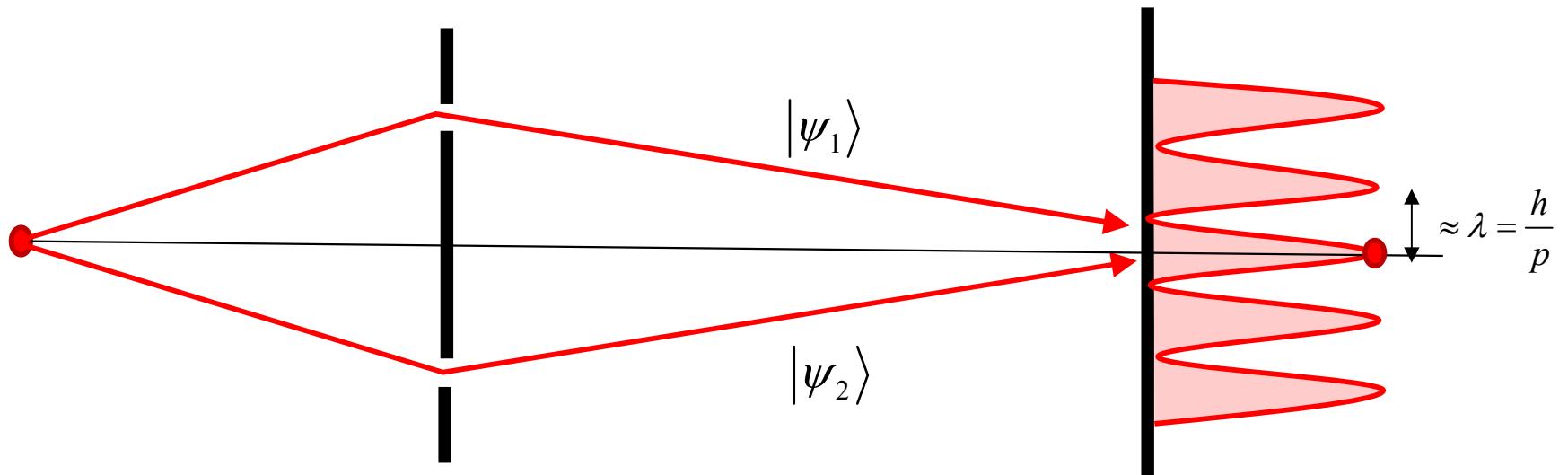


Quel est le «microscope» le plus puissant au monde ?



... le LHC (Large Hardron Collider)

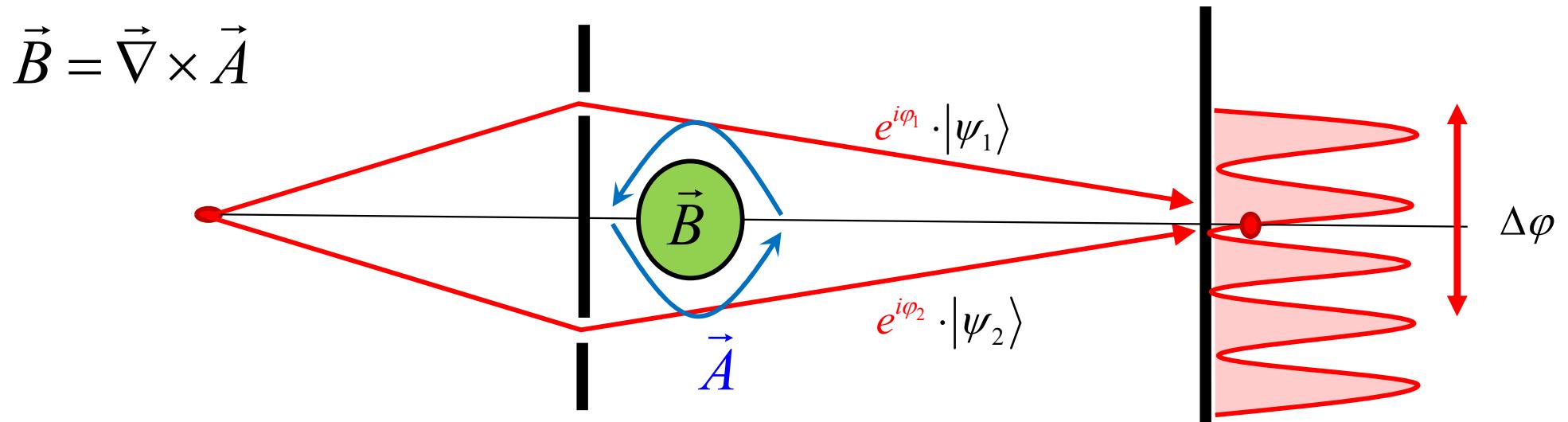
$$\lambda_2 = \frac{h}{p_2} \cong \frac{h}{\sqrt{2m \cdot qV}}$$



Hamiltonien:

$$H = \frac{1}{2m_e} (\vec{P})^2 = \frac{1}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2$$

Modes propres: $|\psi_1\rangle$ $|\psi_2\rangle$



Hamiltonien:

$$H = \frac{1}{2m_e} \left(\vec{P} - q\vec{A} \right)^2$$

Modes propres: $e^{i\varphi_1} \cdot |\psi_1\rangle$ $e^{i\varphi_2} \cdot |\psi_2\rangle$

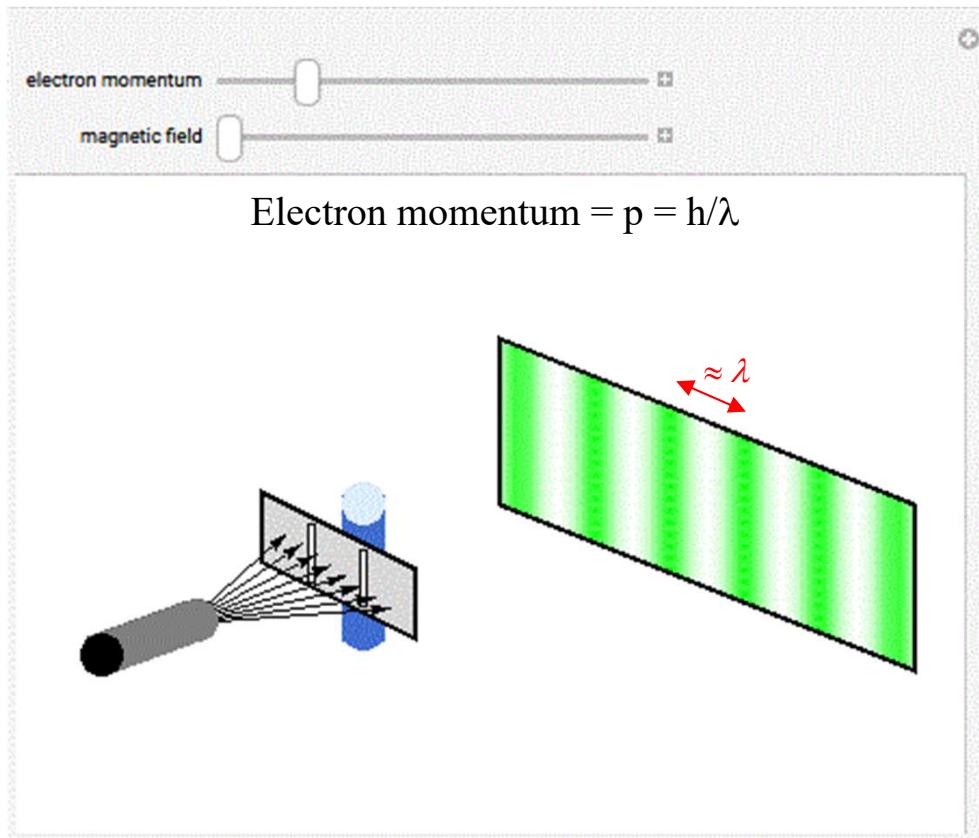
Phase de Berry

$$\varphi = \frac{q}{\hbar} \cdot \int_0^x \vec{A} \cdot d\vec{l}$$

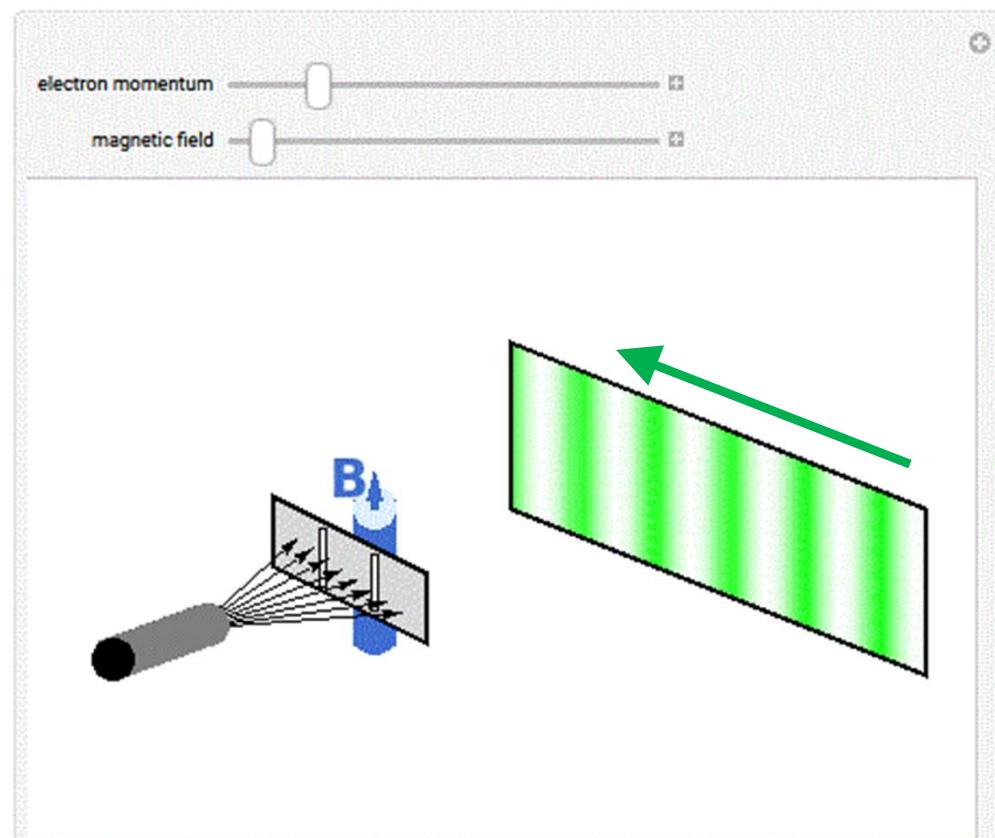
$$\Delta\varphi \equiv \varphi_1 - \varphi_2 = \frac{q}{\hbar} \cdot \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \frac{q}{\hbar} \cdot \iint \vec{B} \cdot d\vec{S} = \frac{q}{\hbar} \phi_{mag}$$

Simulations: interférences d'électrons

$$\vec{B} = 0$$



$$\vec{B} > 0$$



<https://demonstrations.wolfram.com/AharonovBohmEffect/>

$$\Delta\phi = 2\pi \cdot \frac{\phi_{mag}}{\phi_0}$$

$$\phi_0 \equiv \left(\frac{h}{q} \right)$$

Magnetic Flux
Quantum

Opérateurs:

Mesure singulière
Moyenne
Variance

**Un «opérateur» est une
manipulation mathématique de la fonction d'onde**

Hamiltonien:

$$H$$

Schroedinger:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H \cdot |\psi\rangle$$

Propagateur:

$$U \equiv e^{-i \cdot \frac{H}{\hbar} \cdot t}$$

$$|\psi(x, t)\rangle = U \cdot |\psi_0\rangle$$

Opérateurs de mesure

Vecteur position:

$$X = x$$

$$Y = y$$

$$Z = z$$

Vecteur impulsion:

$$P_x = -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial x}$$

$$P_y = -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial y}$$

$$P_z = -i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial z}$$

Energie:

$$E = i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t}$$

Moment cinétique

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

Spin, polarisation

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Opérateur A

$$A \cdot |\varphi_i\rangle = \lambda_i \cdot |\varphi_i\rangle$$

Modes propres $|\varphi_i\rangle$

Valeurs propres λ_i

«base orthonormée»

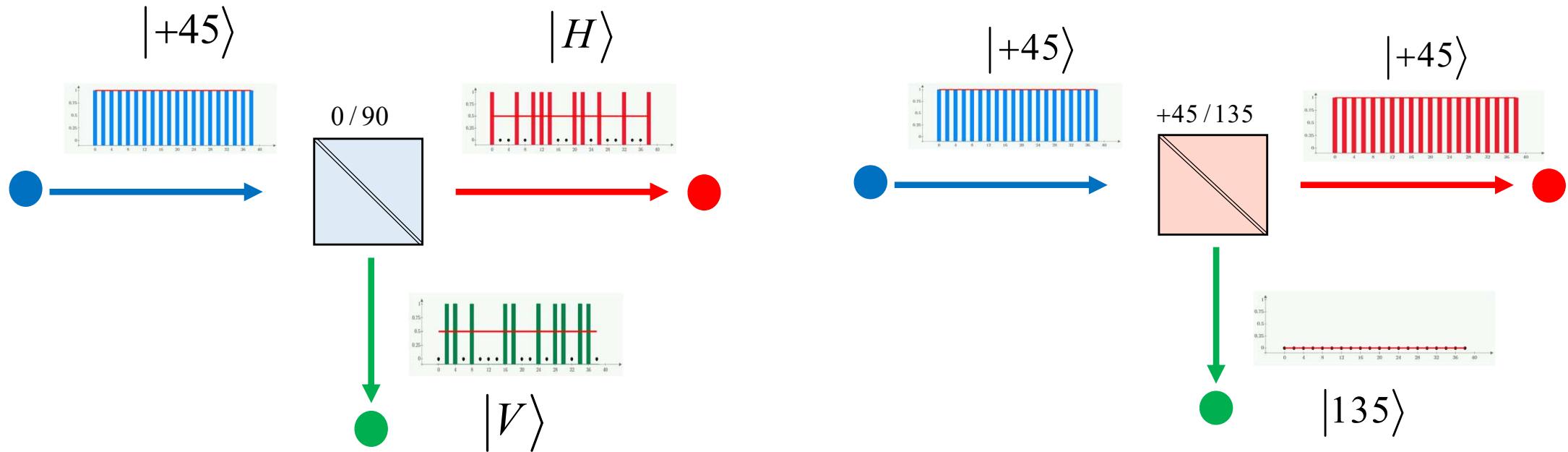
$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$$

**Lors de chaque mesure singulière
la fonction d'onde «collapse»
sur un des modes propres
de l'appareil de mesure**



**La fonction d'onde d'origine est détruite et
devient instantanément celle d'un mode propre**

Exemple de projection: polarisateurs



L'instrument de mesure fait partie de la mesure.

Il détermine les modes propres qui peuvent être obtenus à la sortie

Etat superposé: Décomposition en modes propres

Décomposition de la fonction d'onde dans la base orthonormée:

$$|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i \cdot |\varphi_i\rangle \quad \text{avec} \quad \alpha_i \equiv \langle \varphi_i || \psi \rangle$$

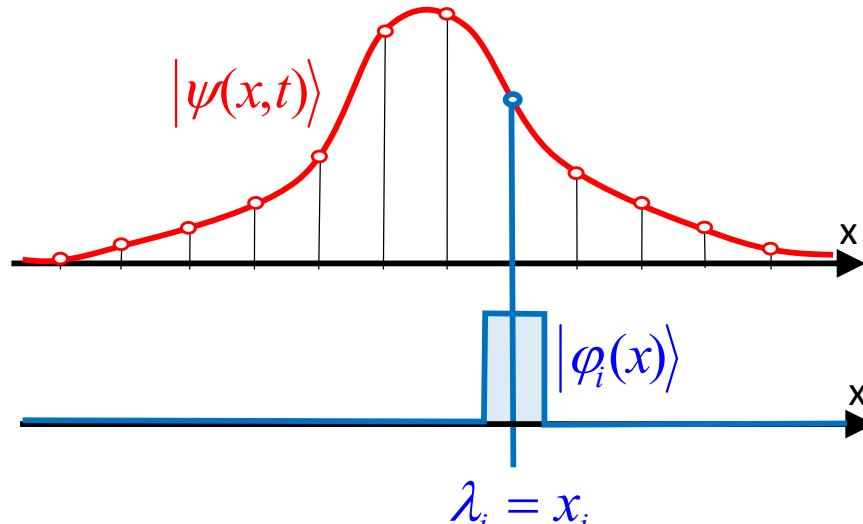
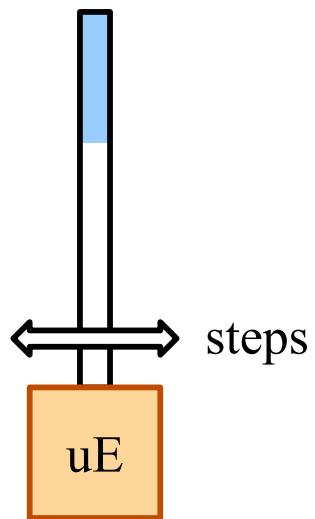
Probabilité de collapser sur le mode propre $|\varphi_i\rangle$ = probabilité de mesurer la valeur λ_i

$$|\alpha_i|^2 = |\langle \varphi_i || \psi \rangle|^2$$

Condition de normalisation:

$$\langle \psi || \psi \rangle = 1 \Rightarrow \sum_i |\alpha_i|^2 = 1$$

Exemple: opérateur position X



$$|\varphi_i(x)\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \\ 1_i \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$X \cdot |\varphi_i(x)\rangle = x_i \cdot |\varphi_i(x)\rangle$$

Moyenne des mesures de la grandeur A:

$$\langle A \rangle \equiv \sum_i |\alpha_i|^2 \cdot \lambda_i$$

Probabilité de
collapser sur $|\varphi_i\rangle$

Valeur mesurée lors
d'un collapser sur $|\varphi_i\rangle$

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \langle A \rangle$$

$$\langle \psi | A | \psi \rangle = \left(\sum_i \alpha_i^* \langle \varphi_i | \right) A \left(\sum_j \alpha_j | \varphi_j \rangle \right) = \left(\sum_i \alpha_i^* \langle \varphi_i | \right) \left(\sum_j \alpha_j A | \varphi_j \rangle \right) = \sum_{ij} \alpha_i^* \alpha_j \cdot \lambda_j \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \sum_i |\alpha_i|^2 \cdot \lambda_i = \langle A \rangle$$

Fonction d'onde normalisée:

$$\langle \psi | \psi \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot \psi(x, t) \cdot dx = 1$$

Moyenne d'un opérateur:

$$\langle A \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot A \cdot \psi(x, t) \cdot dx$$

Second moment d'un opérateur:

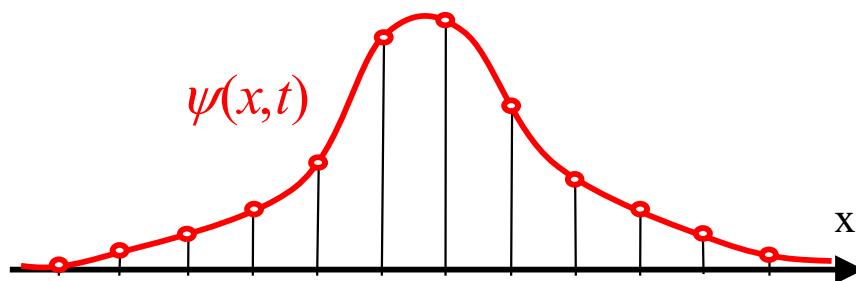
$$\langle A^2 \rangle \equiv \langle \psi | A^2 | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot A^2 \cdot \psi(x, t) \cdot dx$$

Variance (incertitude) d'un opérateur:

$$\Delta A^2 \equiv \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

Exemples

Position X

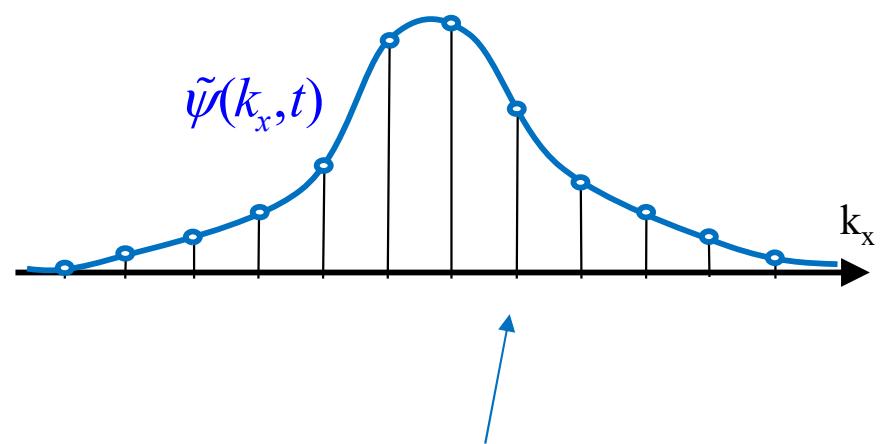


$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot \psi(x, t) \cdot dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot \psi(x, t) \cdot dx}$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \cdot \psi(x, t) \cdot dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \cdot \psi(x, t) \cdot dx}$$

Fourier
⇒

Impulsion P_x



$$= \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(k_x, t) \cdot (\hbar k_x) \cdot \tilde{\psi}(k_x, t) \cdot dk_x}{\int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}^*(k_x, t) \cdot \tilde{\psi}(k_x, t) \cdot dk_x}$$

Incertitudes de Fourier pour des ondes

$$\Delta t \cdot \Delta \omega \geq \frac{1}{2}$$

$$\Delta x \cdot \Delta K_x \geq \frac{1}{2}$$

Incertitudes d'Heisenberg

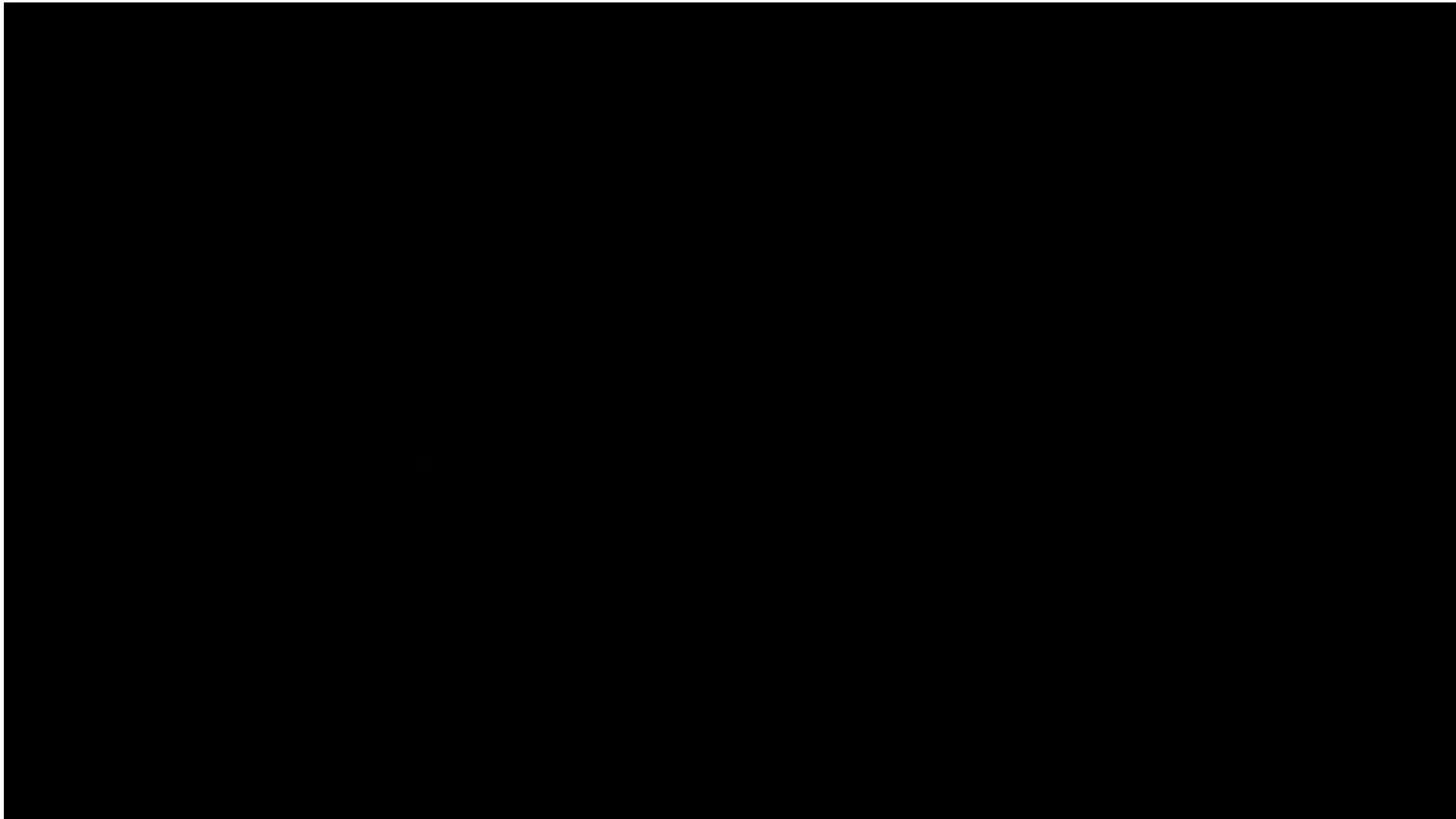
$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$$

<https://youtu.be/p7bzE1E5PMY>



Exercice 2.1 : équation de Schroedinger pour les photons

Opérateurs quantiques: $E \equiv i\hbar \cdot \frac{\partial}{\partial t} \dots$ $\vec{P} \equiv -i\hbar \cdot \left(\frac{\partial}{\partial x} \dots, \frac{\partial}{\partial y} \dots, \frac{\partial}{\partial z} \dots \right)$

Expression de l'énergie d'un photon: $E = \hbar\omega = \hbar \cdot 2\pi \cdot \frac{c}{\lambda} = c \cdot \hbar |k| = c \cdot |\vec{p}|$

- Réécrivez cette expression pour le carré de l'énergie.
- Appliquez les opérateurs quantiques
- Quelle équation obtenez-vous ?

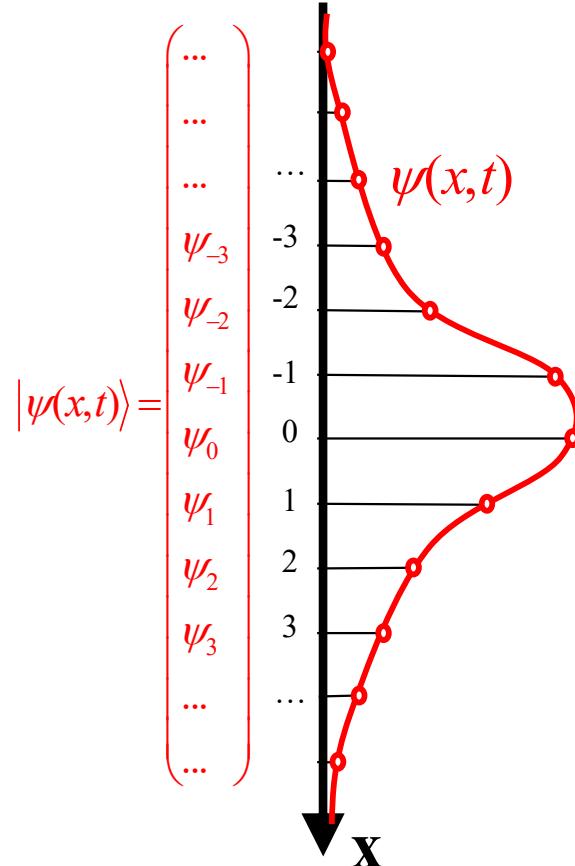
Considérez la fonction d'onde ci-contre:

Comment exprimer sous forme de matrice:

1) l'opérateur X (position) ?

2) l'opérateur P (impulsion)

«Ket»



Exercice 2.3:
Opérateurs moments cinétiques

Expressions classiques:

$$\vec{L} = \vec{x} \times \vec{p}$$

Trouvez les opérateurs quantiques correspondant à:

$$L_x = ?$$

$$L_y = ?$$

$$L_z = ?$$

Propagateur:

$$U \equiv e^{-i \frac{H}{\hbar} \cdot t}$$

1) Utilisez le développement de Taylor pour définir l'exponentielle d'un opérateur

2) Quel est le résultat si $\vec{H} = \Gamma \cdot \vec{\sigma}$ avec $\vec{\sigma}^2 = \vec{1}$