# Rappèl

**L'impulsion en Physique Quantique est représentée par un opérateur** agissant sur la fonction d'onde.

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

Plus en général, **chaque quantité physique observable en Physique Quantique es représentée par un opérateur**. La position est représentée par l'opérateur position, qui agit sur une fonction en la multipliant par sa variable

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$$

Nous avons étudié le puits de potentiel avec barrières finies. Ses états propres confinés sont quantifiés et les fonctions d'onde sont non-zéro même dans les régions des barrières qui seraient interdite pour une particule classique.

Ce phénomène, appelé **effet tunnel**, est très commun en Physique Quantique et on l'a étudié également pour une particule qui traverse une barrière de potentiel.

# Cours 08

Le processus de mesure en Physique Quantique

L’oscillateur harmonique

Lien avec le rayonnement électromagnétique et le photon

# Le processus de mesure en Physique Quantique

**Une théorie physique doit décrire correctement les résultats des mesures expérimentales.**

En Physique Quantique, le processus de mesure est en général caractérisé par **un comportement aléatoire**.

Si un système se trouve dans un état décrit par une fonction d'onde $\psi(x)$, la mesure de la position x donne une valeur aléatoire, dont la **distribution de probabilité** est

$$P(x) = |\psi(x)|^2$$

Que veut-il dire «aléatoire»?

Supposons que **l'expérimentateur dispose de N particules** et que l'état de chaque particule est le même, c.-à-d. il est décrit par la même fonction d'onde $\psi(x)$

L'expérimentateur effectue **le même processus de mesure** de l'observable $\hat{x}$ **sur chacune des N particules**. **Chaque mesure donnera un résultat en principe différent**. Appelons ces résultats

$$x_0,\, x_1,\, \ldots,\, x_N$$

**La théorie dit que ces N valeurs de x vont être distribuées selon la distribution de probabilité** *P(x)*.

# Le processus de mesure en Physique Quantique

Supposons maintenant que l'expérimentateur effectue la mesure de $\hat{x}$ sur une particule qui se trouve dans l'état décrit par la fonction d'onde $\psi(x)$. Il obtient le résultat $x_0$.

On rappelle que dans ce raisonnement on ne fait pas intervenir les possibles erreurs de mesure, car il est toujours possible d'imaginer un processus de mesure assez avancé pour rendre ces erreurs négligeables.

L'expérimentateur maintenant décide de vérifier son résultat et **il effectue donc une deuxième mesure de $\hat{x}$ sur la même particule qui avait déjà subi la première mesure**. **Dans ce cas l'expérimentateur trouvera, avec certitude, la même valeur $x_0$ mesurée avant.**

Ce fait est prévu par la théorie et confirmé par les plusieurs expériences qu'on effectue chaque jour.

**Comment la deuxième mesure peut-elle donner le même résultat avec certitude?**

La seule explication compatible avec la Physique Quantique est que, **après la première mesure, la particule se trouve dans un nouvel état**, en général différent de $\psi(x)$

**Dans ce nouvel état, la probabilité de mesurer $x=x_0$ doit être égale à 1** (et toutes les autres valeurs doivent avoir probabilité nulle).

Ce changement d'état, après une mesure, s'appelle **«collapse de la fonction d'onde»**. Il est implicite dans le processus de mesure. Il n'est pas simplement produit par la perturbation que l'instrument de mesure induit sur le système. Autrement, on pourrait l'éviter en concevant un processus de mesure plus «gentil». Mais ça c'est impossible selon la théorie, et **le collapse est en général inévitable**.

# Le processus de mesure en Physique Quantique

Quelle est la fonction d'onde $\psi(x)$ qui a cette propriété?

Même si les détails mathématiques sont un peu fastidieux, la fonction d'onde qui donne la certitude que la mesure de la position donne le résultat $x_0$, est la fonction «delta» de Dirac

$$\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$$

Nous savons que cette fonction est différente de zéro partout sauf en x=$x_0$. Par contre en x=$x_0$ elle vaut infini, car son intégrale doit être égal à 1. Le carré de cette fonction est également mal défini.

En réalité, formellement cet objet est une **«fonction généralisé»**. **Elle n'a un sens que comme argument d'une intégrale**. Pour les besoins de la Physique Quantique, cela nous suffit, car la fonction d'onde est principalement utilisée dans des intégrales, pour calculer les valeurs moyennes.

La fonction delta est définie ainsi: pour toute fonction *f(x)*, on a

$$\int_a^b dx\, f(x)\delta(x - x_0) = f(x_0)$$

à condition que la valeur $x_0$ soit inclue dans l'intervalle [a,b].

# Le processus de mesure en Physique Quantique

La fonction d'onde $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ a une propriété spéciale si on lui applique l'opérateur position $\hat{x}$

$$\begin{aligned}\hat{x}\psi_{x_0}(x) &= x\psi_{x_0}(x) \\ &= x\delta(x - x_0) \\ &= x_0\delta(x - x_0)\end{aligned}$$

Ici, la première égalité suit de la propriété de l'opérateur $\hat{x}$ . La troisième ligne s'explique par le fait que la fonction delta est zéro partout sauf en x=$x_0$. Donc on peut remplacer la variable x par la valeur fixe $x_0$.

La relation qu'on vient d'obtenir dit que la fonction $\psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ est une **«fonction propre» de l'opérateur $\hat{x}$ , avec valeur propre $x_0$.**

$$\hat{x}\,\psi_{x_0}(x) = x_0\,\psi_{x_0}(x)$$

# Le processus de mesure en Physique Quantique

Les fonctions propres des opérateurs associés aux quantités observables jouent un rôle fondamental dans le processus de mesure.

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x)$$

**Les seules valeurs possibles de la mesure de l'observable $A$ sont ses valeurs propres $a_n$**

**Si l'état de la particule est un des états propres de $A$ – supposons $\psi_{42}(x)$ – alors la mesure de $A$ donnera avec certitude la valeur $a_{42}$**

Si, par contre, la particule se trouve dans un état $\psi(x)$ quelconque, on peut toujours exprimer cet état par un expansion en états propres de $A$. On suppose toutes les fonctions normées. Cela implique

$$\psi(x) = \sum_j c_j\psi_j(x) \qquad \text{avec} \qquad \sum_j |c_j|^2 = 1$$

Si l'état avant mesure est $\psi(x)$, alors la mesure de $A$ donnera de façon aléatoire une des valeurs propres $a_n$ avec probabilité

$$p_n = |c_n|^2$$

L'état de la particule après la mesure sera $\psi_n(x)$ . A partir de cet état, toutes mesures suivantes de A donneront avec certitude la même valeur an

# Le processus de mesure en Physique Quantique

Supposons d'avoir deux quantités observables A et B. Les opérateurs correspondants seront $\hat{A}$ et $\hat{B}$.

Si les deux opérateurs «commutent», c.-a-d. si

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0$$

alors on peut trouver un ensemble d'états qui sont états propres de A et de B

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x) \qquad \hat{B}\psi_n(x) = b_n\psi_n(x)$$

Dans un tel cas, en partant d'un état quelconque, la mesure de A donnera une des valeurs propres an, et par la suite la mesure de B et de A, effectuées sur le même système, donneront toujours les valeurs an et bn.

Si, par contre, $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ , alors chaque opérateur aura un ensemble d'états propres différents. Un état propre de A ne sera pas en général aussi état propre de B.

$$\hat{A}\psi_n(x) = a_n\psi_n(x) \qquad \hat{B}\varphi_n(x) = b_n\varphi_n(x)$$

Dans ce cas, en partant d'un état quelconque, des mesures alternées de A et de B pourront donner en général des valeurs différentes.

Mes. de A -> a3. Nouvel état $\psi_3(x)$. Mes. de B -> b7. Nouvel état $\varphi_7(x)$. Mes. de A -> a15. Nouvel état $\psi_{15}(x)$. etc.

# Le processus de mesure en Physique Quantique

Quels sont les fonctions propres de l'opérateur impulsion? On a vu que

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Pour trouver les fonctions propres il faut donc résoudre

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = p\psi(x)$$

La solution est

$$\psi(x) = Be^{ipx/\hbar}$$

**L'onde de de Broglie est donc une fonction propre de l'impulsion**. Si on mesure l'impulsion d'une particule qui se trouve dans cet état, on obtiendra avec certitude *p* comme résultat de la mesure.

# Le processus de mesure en Physique Quantique

A remarquer que l’onde de de Broglie est infiniment étendue dans l’espace. **La particule dans cet état a donc une probabilité uniforme de se trouver à tout endroit de l’espace.**

L’état pour lequel la mesure de p donne un résultat certain, a un maximum d’incertitude si on mesure x.

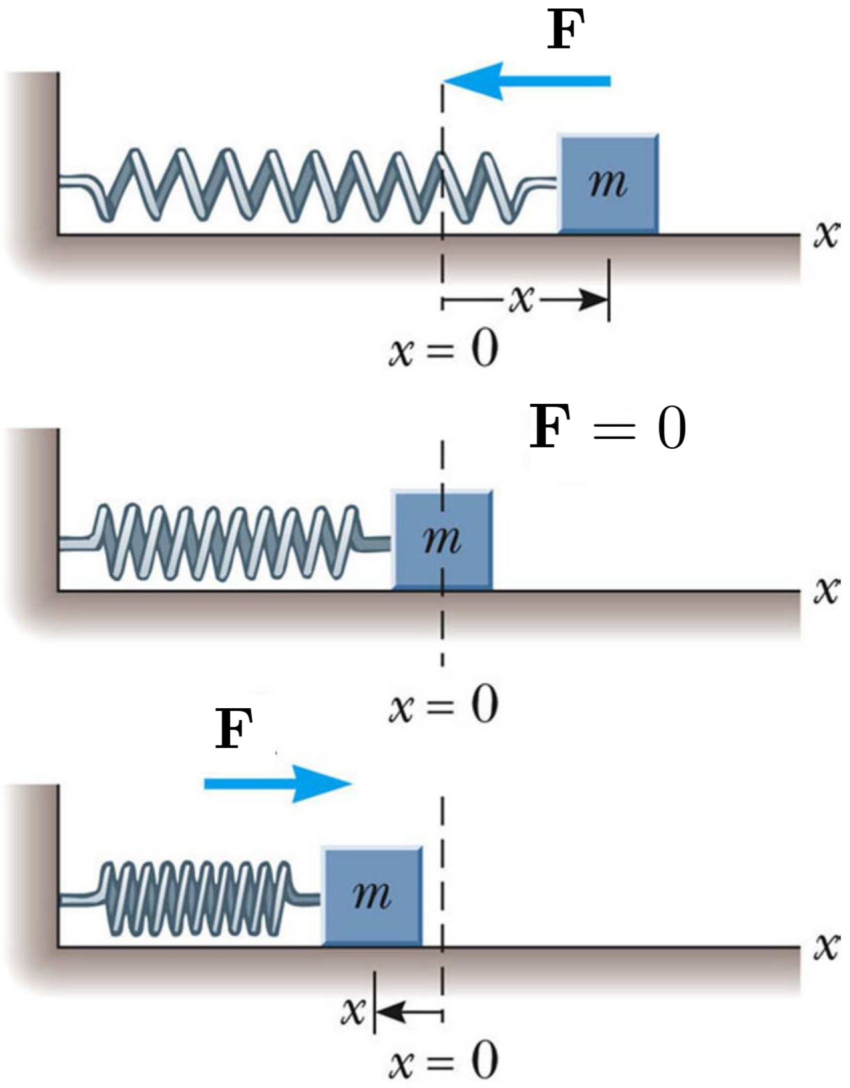
Vice-versa, l’état décrit par la fonction delta de Dirac est tel que la mesure de x donne une valeur certaine. On peut montrer que **pour cet état la mesure de p est caractérisée par une incertitude maximale**.

Il s’agit encore d’une manifestation du **principe d’incertitude de Heisenberg**.

# L'oscillateur harmonique classique

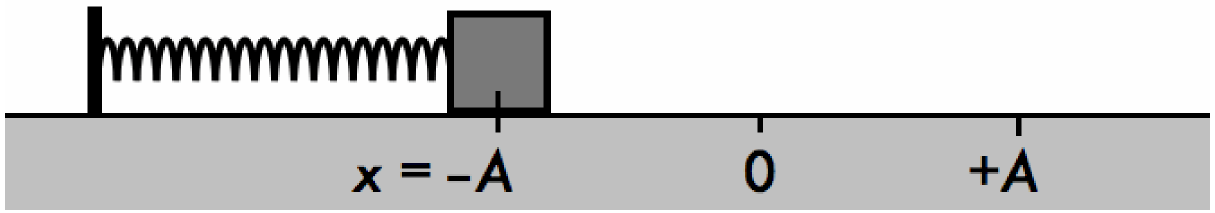
L'oscillateur harmonique classique est le modèle d'une particule de masse m, soumise à une force de rappel *F=-kx*. Cette force est donc proportionnelle au déplacement de la position d'équilibre *x*=0, et s'oppose à ce déplacement. Cette force est décrite par une potentiel de la forme

$$U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \qquad \omega = \sqrt{k/m}$$




Si on déplace la masse à la position *x=-A* et on laisse évoluer, la masse va osciller entre les positions x=-*A* et x=+*A*. A ces deux points, la vitesse est nulle et toute l'énergie est de type potentiel: $E = m\omega^2 A^2/2$

En x=0, l'énergie potentielle est nulle et toute l'énergie est de type cinétique: $E = mv^2/2$



# L'oscillateur harmonique classique

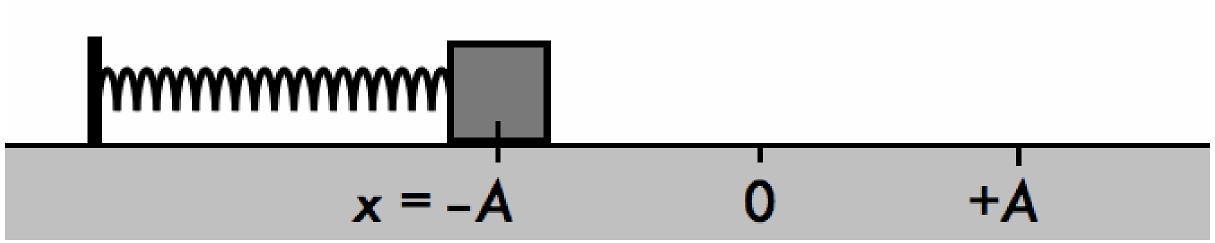
On remarque deux propriétés fondamentales

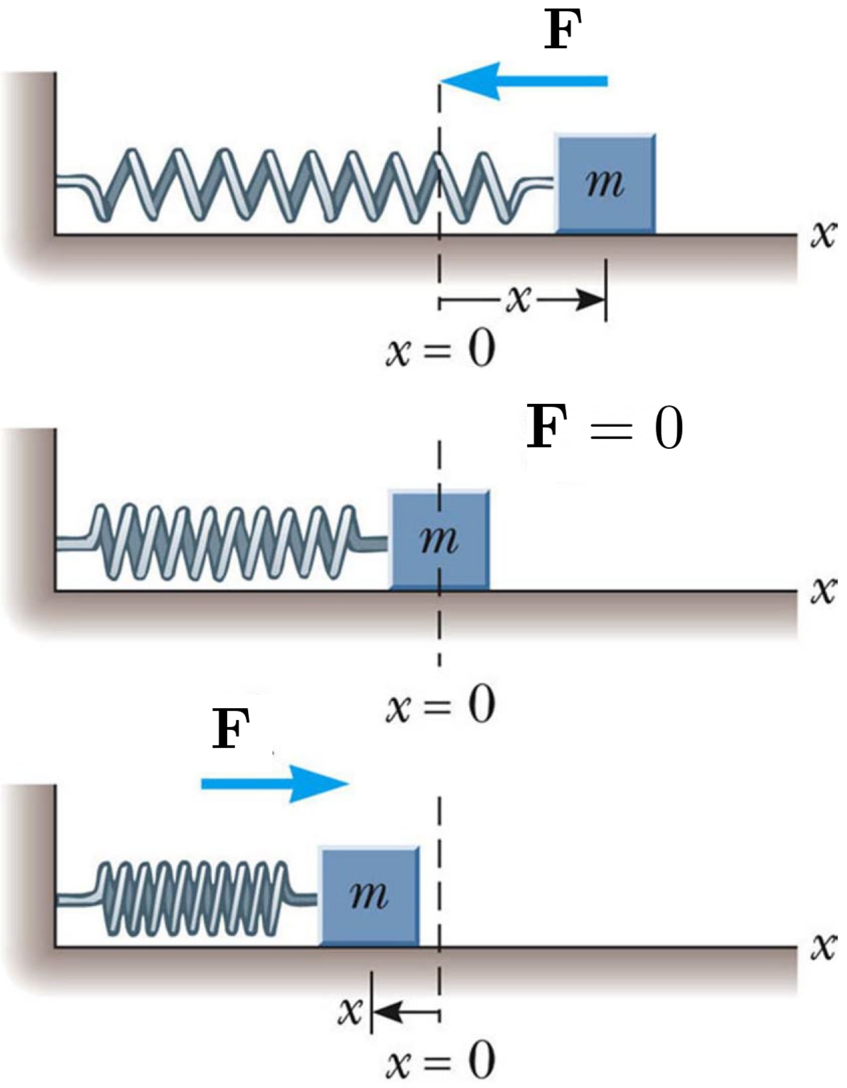
**Toutes valeurs de *A* sont admises**: on peut initier le mouvement en choisissant le déplacement initial *A* sans contraintes. Puisque l'énergie totale est

$$E = m\omega^2 A^2/2$$

on déduit que **toutes les valeurs de l'énergie sont admises**.

Une fois choisi la déplacement initial *A*, la masse oscille entre *x*=-*A* et *x*=+*A*. Il est impossible pour la masse de se déplacer plus loin d'une distance A de la position d'équilibre.



# L’oscillateur harmonique quantique

On décrit **l’oscillateur harmonique quantique** avec l’équation de Schrödinger

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

Comme pour la particule dans un puits de potentiel, il faut trouver les solutions de cette équation différentielle qui en plus satisfont les **conditions au bord**. Ici en particulier, il faut s’assurer que la solution décroit en $x\to\pm\infty$ suffisamment vite pour qu’elle ait une norme finie.

On remarque que la fonction Gaussienne est une solution possible

$$\psi(x)=Be^{-Cx^2}$$

où *B* est la constante de normalisation et *C* est à déterminer. Si on remplace dans l’équation, on obtient

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-2C+4C^2x^2\right)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E$$

Il faut donc annuler les termes proportionnels à $x^2$ et les termes constants séparément. Ceci est possible pour

$$C=\frac{m\omega}{2\hbar}\qquad\qquad E=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

# L'oscillateur harmonique quantique

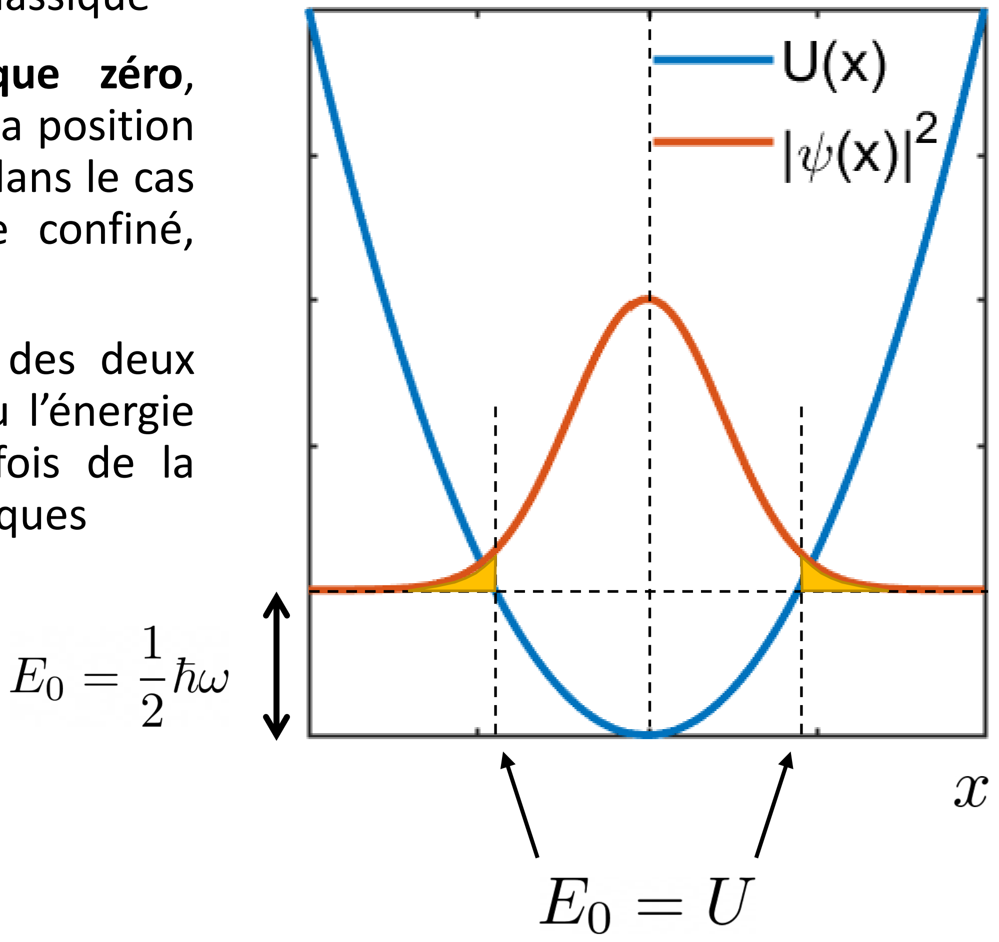
La solution qu'on vient de trouver correspond à *l'état fondamental de l'oscillateur harmonique quantique*.

On remarque deux différences fondamentales par rapport au cas classique

**L'énergie totale de l'état fondamental est plus grande que zéro**, contrairement au cas classique (où on peut mettre la particule à la position d'équilibre et sans mouvement). On avait déjà trouvé ce résultat dans le cas du puits de potentiel carré. Cette énergie, pour un système confiné, s'appelle **«énergie du point zéro»**.

La probabilité de trouver la particule est finie même au-delà des deux positions qui représentent la limite du mouvement classique (où l'énergie totale est égale à l'énergie potentielle). Il s'agit encore une fois de la manifestation de l'**effet tunnel**, qui caractérise les systèmes quantiques

$$\psi(x) = Be^{-(m\omega/2\hbar)x^2}$$



# Oscillateur harmonique: états excités

On peut trouver l'ensemble des solutions de l'équation de Schrödinger pour l'oscillateur harmonique, mais ça demande un peu de calculs. Ici on donne directement le résultat pour tous les états propres et énergies.

$$\psi_n(x) = B_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)e^{-(m\omega/2\hbar)x^2}$$

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots$$

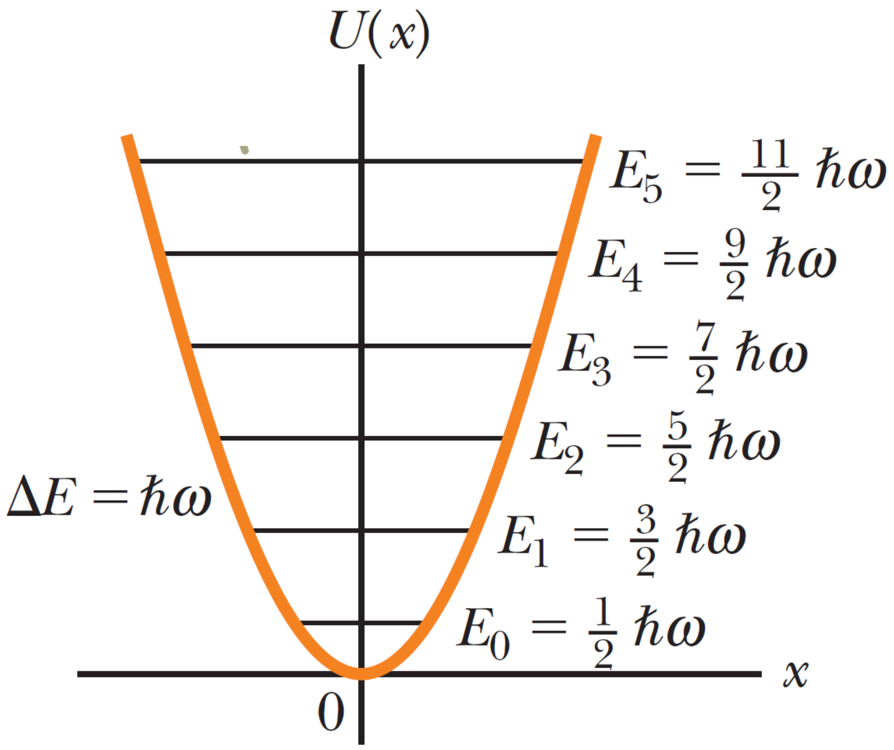
Les fonctions $H_n$ sont des polynômes spéciaux: les **polynômes de Hermite**, et $B_n$ les constantes de normalisation

$$H_0(x) = 1$$
$$H_1(x) = 2x$$
$$H_2(x) = 4x^2 - 2$$
$$\vdots$$

# Oscillateur harmonique: états excités

$$\psi_n(x) = B_n H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} \quad E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots$$

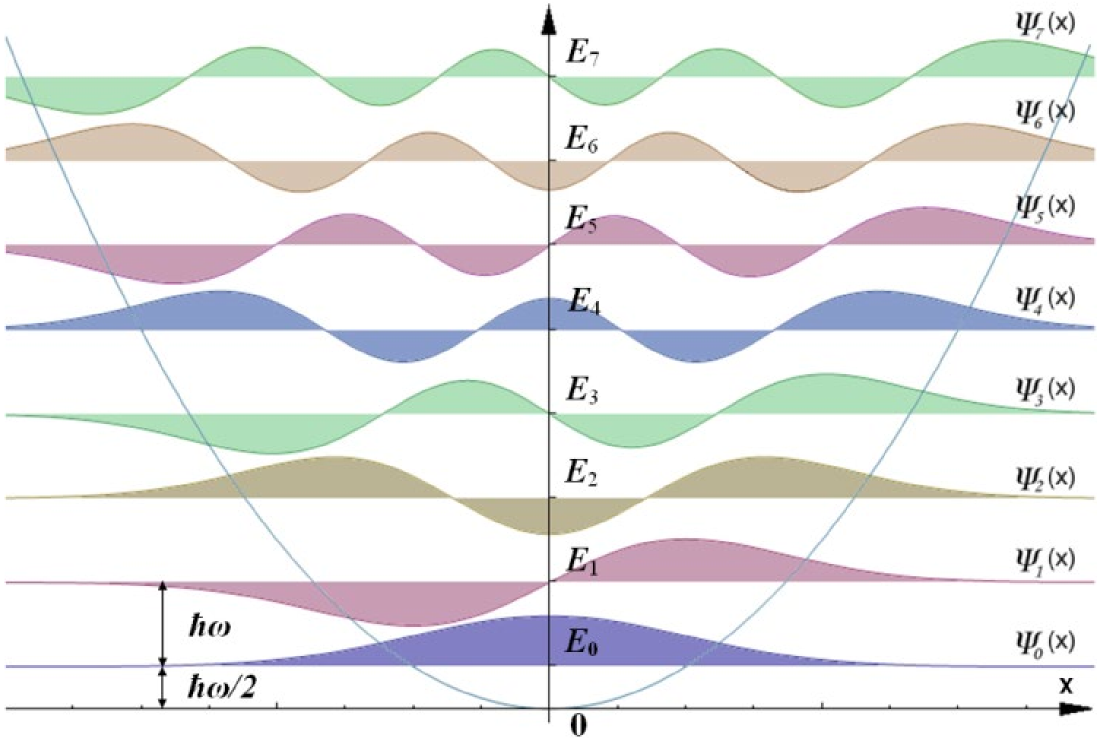
On remarque que **les énergies propres sont uniformément espacées**. Le résultat est surprenant, car on retrouve exactement la **quantification de l'énergie** introduite phénoménologiquement par Max Planck en 1900!!!

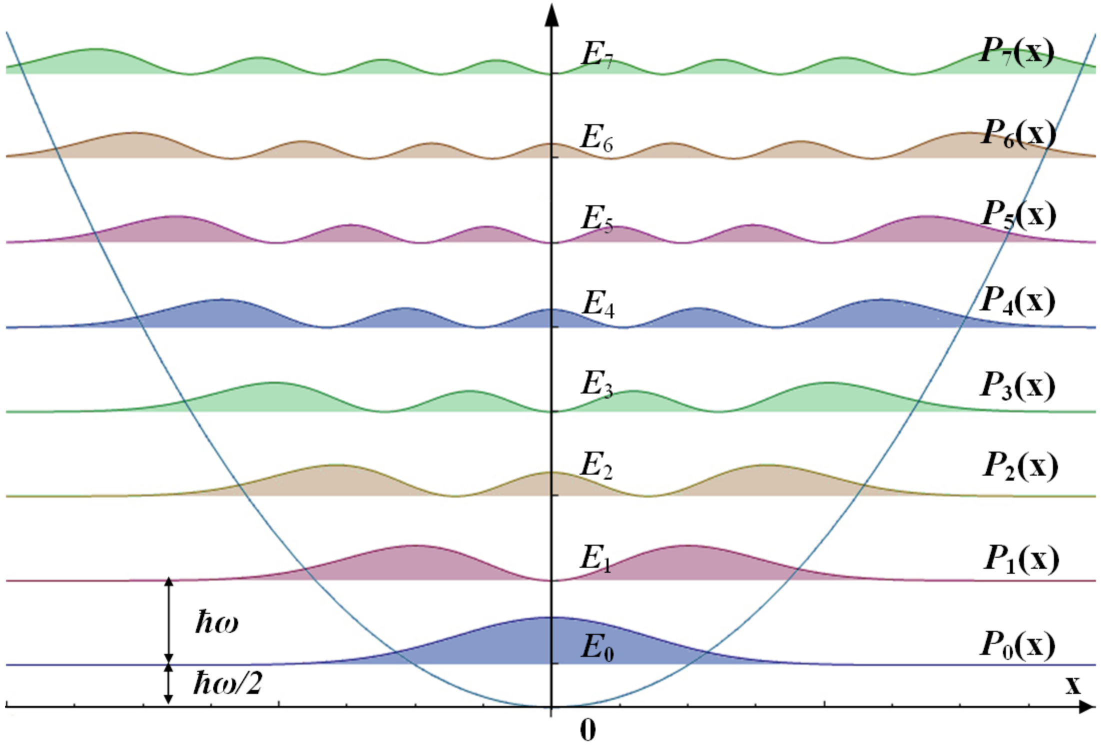


# Oscillateur harmonique: états excités

Les fonctions d'onde (gauche) des états avec nombre quantique *n* sont paires (par rapport à *x*-> -*x*) pour *n* pair, et impaires pour *n* impair.

Les densités de probabilité (droite) montrent une probabilité finie de trouver la particule en dehors de la limite classique du mouvement. En revanche, certains points à l'intérieur de la région de l'espace classiquement admise sont interdits!



# Lien avec l’électromagnétisme

En 1927, Paul M. Dirac pour la première fois a établi le lien entre les lois de l’électromagnétisme et la physique quantique. Il a ainsi initié le domaine de **l’électrodynamique quantique**.

Intuitivement, **une onde électromagnétique à une fréquence angulaire $\omega$ donnée, se comporte comme un oscillateur harmonique**. Les champs électrique et magnétique oscillent à chaque point de l’espace avec une loi harmonique.

On peut appliquer la théorie de l’oscillateur harmonique quantique au champ électromagnétique. La procédure est connue sous le nom de **«deuxième quantification»**.

La conséquence naturelle est que **les valeurs propres de l’énergie totale de l’onde électromagnétique sont quantifiées**, et que le quantum d’énergie est $\Delta E = \hbar\omega$

L’électrodynamique quantique permet ainsi d’expliquer très naturellement l’hypothèse initialement formulée par Planck en 1900.

**L’électrodynamique quantique permet aussi d’expliquer la nature corpusculaire du photon et son interaction avec d’autres particules chargées**. La théorie a été développée par plusieurs scientifiques après 1927, et a constitué le premier succès dans la recherche d’une théorie de grande unification des forces fondamentales, qui à aujourd’hui n’est pas encore conclue.

# Questions ouvertes

Comment on résout l'équation de Schrödinger pour d'autres modèles physiques? Par exemple pour l'oscillateur harmonique, ou pour les électrons autour des atomes?

Comment on généralise la théorie au cas avec plusieurs particules en interaction?

Avec une théorie quantique à plusieurs particules en interaction, arrive-t-on à expliquer la structure des atomes et de la matière en général?