Rappels sur la mécanique quantique

3.1 Introduction

Plusieurs tentatives ont été nécessaires avant d'aboutir à la formulation actuelle de la mécanique quantique. Plus précisément, au milieu des années 1920, il y avait deux approches concurrentes pour modéliser les phénomènes quantiques: celle de Heisenberg, Born, Jordan et Dirac, appelée *mécanique des matrices*, et celle de Schrödinger, appelée *mécanique ondulatoire*.
Avant de détailler ces deux théories, rappelons les points essentiels de la mécanique classique (mécanique analytique). Cette dernière est basée sur le formalisme de Lagrange.

3.2 Rappel du formalisme de Lagrange

Le formalisme de Lagrange représente un outil extrêmement puissant pour décrire l'évolution d'un problème physique. Initialement aborder sous la forme du principe de moindre action, il permet de déterminer le comportement d'un système, dès que l'expression d'une grandeur physique, le lagrangien, est connue.
L'objectif de ce rappel est de revoir les notions fondamentales de la théorie lagrangienne, tout d'abord dans le cadre de l'étude d'une particule massive, puis dans celui de la théorie des champs.

3.2.1 Principe de moindre action

Étant dans un état initial donné, un système physique a une infinité de façons d'évoluer jusqu'à un état final donné:

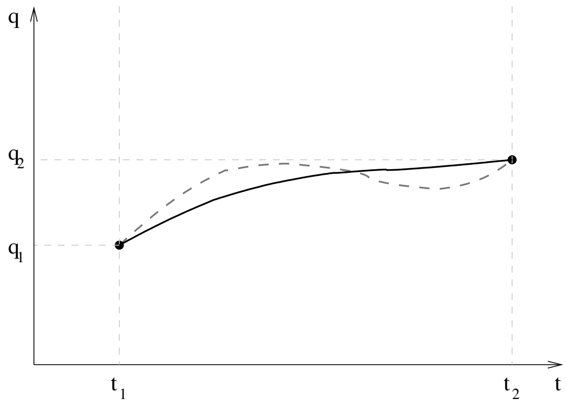

Figure 3.1: Transformation dans l'espace des coordonnées généralisées.

Pour tant, lors d'une transformation réelle une seule de ces transformations (évolutions) est effectivement réalisées. Comment peut-on déterminer cette évolution privilégiée et la différentiée des autres? C'est à cette question que répond le principe de moindre action, qui peut être considérer comme l'un des postulats de la physique.
D'après le principe de moindre action, il existe une quantité appelée "Action" définit par,

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt\ L(q_i(t), \dot{q}_i(t), t) \qquad , \qquad i = 1 \longrightarrow N \tag{3.1}$$

dont la valeur change lors de l'évolution du système et qui doit être minimale le long de la transformation réelle. L'action S est définie comme l'intégrale d'une quantité appelée "Lagrangien", et qui est fonction des coordonnées généralisées q et des vitesses généralisées $\dot{q}(t) = \frac{dq}{dt}$.

3.2.2 Équations d'Euler-Lagrange

Parmi toutes les trajectoires qui passent par les deux points fixes $(\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0)$ de coordonnées généralisées $Q_1 = q(t_1)$ et $Q_2 = q(t_2)$, les trajectoires physiques sont celles qui rendent l'action S minimale $\Delta S \simeq 0$.

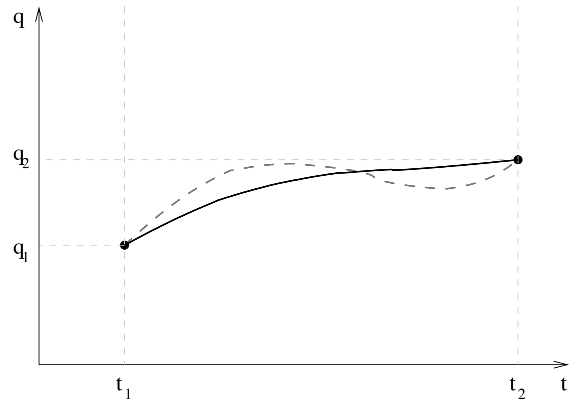

Figure 3.2: Transformation dans l'espace des coordonnées généralisées.

Si $\delta(q(t))$ est une fonction infinitésimale, alors

$$\Delta S[q] \simeq S(q+\delta q) - S(q) \tag{3.2}$$

On a

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt\ L(q,\dot{q},t) \quad \Longrightarrow \quad \Delta S[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt[\ L(q+\delta q,\dot{q}+\delta\dot{q},t) -\ L(q,\dot{q},t)] \tag{3.3}$$

Or,

$$L(q+\delta q,\dot{q}+\delta\dot{q},t) = L(q,\dot{q},t) + \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q} \tag{3.4}$$

Donc,

$$\begin{aligned}\Delta S[q] &= \int_{t_1}^{t_2} dt\left[L(q,\dot{q},t) + \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q} -\ L(q,\dot{q},t)\right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt\left[\frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial q}\delta q + \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q}\right] \simeq 0\end{aligned} \tag{3.5}$$

Si on pose

$$\delta\dot{q} = \frac{d}{dt}(\delta q) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial L(q,\dot{q},t)}{\partial \dot{q}}\delta\dot{q} = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}(\delta q) \tag{3.6}$$

On aussi,

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] = \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right]\delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}(\delta q) \quad \Longrightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{d}{dt}(\delta q) = \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] - \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right]\delta q \tag{3.7}$$

En remplaçant dans l'équation (3.5), on retrouve,

$$\begin{aligned}\Delta S[q] &= \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q}\delta q + \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] - \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right]\delta q\right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt\delta q \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right]\right] + \int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] \simeq 0 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Où

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \frac{d}{dt}\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] = \int_{t_1}^{t_2} d\left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\delta q\right] = 0 \tag{3.9}$$

Finalement, les équations d'Euler-Lagrange sont données par,

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0 \tag{3.10}$$

3.2.3 Choix du lagrangien

Le choix du lagrangien n'est pas unique.

- Si on remplace le lagrangien L par (αL), où α est un réel, alors les équations de mouvement restent inchangées.
- Si on remplace le lagrangien L par $(\beta + L)$, où β est une constante, alors les équations de mouvement restent inchangées.
- Si on remplace le lagrangien L par $(L + \frac{dF}{dt})$, où $F = F(q, \dot{q}, t)$ est un lagrangien, alors les équations de mouvement restent inchangées.

Exercice 1 :
Montrer que la variation ΔS reste invariante par changement du lagrangien L par $L + \frac{dF}{dt}$.

3.2.4 Formulation hamiltonienne

L'hamiltonien H est donné par

$$H(p, q, t) = P_i \dot{q}_i - L \tag{3.11}$$

L'impulsion généralisée est donnée par

$$P_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \tag{3.12}$$

Exercice 2 :
Montrer que si le lagrangien L ne dépend pas explicitement du temps t, alors $\frac{dH}{dt} = 0$
Solution 3:

$$\frac{dH}{dt} = p\frac{\partial \dot{q}}{\partial t} + \dot{q}\frac{\partial p}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial q}\frac{\partial q}{\partial t} - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial t} \tag{3.13}$$

Or, on a

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad \text{et} \quad \frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = 0 \tag{3.14}$$

Donc,

$$\frac{dH}{dt} = \left(\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right) - \frac{\partial L}{\partial q}\right)\frac{\partial q}{\partial t} = -\left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\right)\right)\frac{\partial q}{\partial t} = 0 \tag{3.15}$$

3.3 Modélisation d'une onde

En raison de la nature ondulatoire de la matière, nous avons besoin de nous intéresser de plus près à ce qu'est une onde et à la méthode adéquate à utiliser pour modéliser mathématiquement son mouvement dans l'espace-temps. D'un point de vue mathématique, le mouvement d'une onde peut être décrit en faisant intervenir la solution de l'équation d'onde suivante:

$$\Box \phi = 0 \tag{3.16}$$

où l'opérateur D'Alembertien est donné par l'expression

$$\Box := -\partial_{tt} + \Delta$$

Une onde sera, alors, modélisée par une fonction ϕ, solution de l'équation (3.16). Une solution évidente de l'équation (3.16) est la fonction

$$\phi(x,t) = \phi_o e^{i(k \cdot x - \omega t)} \tag{3.17}$$

où x représente le vecteur position, t le temps, k le vecteur d'onde (c'est-à-dire le vecteur de propagation d'onde), ω est la fréquence de l'onde et $x \cdot k$ est le produit scalaire.

3.4 Équation de Schrödinger

L'idée, ici, c'est de modéliser les particules de la même manière que des ondes, à savoir par une fonction ψ. La probabilité de trouver la particule à l'instant t est égale à

$$\int |\psi(x,t)|^2 dx. \tag{3.18}$$

Ceci, impose que

$$\int_{R^3} |\psi(x,t)|^2 dx = 1. \tag{3.19}$$

Le principe fondamental de la mécanique ondulatoire est énoncée comme suit:
La fonction d'onde ψ d'une particule de masse m évoluant dans le vide et soumise à aucune interaction est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \tag{3.20}$$

où $\hbar$ est une constante universelle appelée constante de Planck *et où le laplacien Δ est un laplacien spatial, avec la convention de signe suivante:*

$$\Delta = \partial_{11} + \partial_{22} + \partial_{33}.$$

La constante de Planck $\hbar$ possède les dimensions d'une énergie multipliée par le temps, ou de manière équivalente d'une quantité de mouvement par une longueur. Sa valeur est exprimée en Joule.Secondes:

$$\hbar = 1,054571628 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

Dans le cas d'une particule placée dans un potentiel, on a
La fonction d'onde ψ d'une particule placée dans un potentiel $V(x,t)$ est solution de:

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi. \tag{3.21}$$

3.5 L'oscillateur harmonique

Cette partie sera traitée sous forme d'exercice (voir l'exercice 3).

3.6 Équation de Pauli

Cette partie sera traitée sous forme d'exercice (voir l'exercice 4).

3.7 Exercices d'application

Exercice 3 :

A l'instant t_o, l'état du système de l'oscillateur harmonique linéaire à une dimension est donné par $\phi(x,0) = e^{a^+}\psi_0(x)$; les $\psi_n(x)$ sont les fonctions propres de $H_o = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$ correspondant aux valeurs propres $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, n est un entier.

1. Quelle est la fonction d'onde normée à l'instant t ?
2. Quelle est la probabilité de trouver l'énergie E à l'instant t ?

Exercice 4 :

1. En utilisant le produit des matrices de Pauli donné par les formules: $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon^{ijk}\sigma_k$, Montrer que:
$$(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{A})(\overrightarrow{\sigma}\overrightarrow{B}) = \overrightarrow{A}\overrightarrow{B} + i\overrightarrow{\sigma}(\overrightarrow{A} \wedge \overrightarrow{B})$$
lorsque $\overrightarrow{A}$ et $\overrightarrow{B}$ commutent avec $\overrightarrow{\sigma}$.
2. Trouver la forme générale de l'équation de Pauli libre.