Résumé du cours de mécanique quantique : séance 1

Clément Mazzocchi
d'après le cours donné par Éric Cances
École des Ponts ParisTech

2023-2024

Table des matières

1 Description quantique d'une particule **1**

2 Propriétés de l'équation de Schrödinger **2**

3 Reformulation opérationnelle **3**

4 États stationnaires **3**
4.1 Théorie classique . . . 3
4.2 Théorie quantique . . . 4

5 Mesures de quantités physiques **4**

Ce document vise à résumer la première séance du cours d'introduction à la mécanique quantique donné par Éric Cances à l'École nationale des ponts et chaussées. Il résume en quelques pages l'essentiel du cours et les résultats fondamentaux.

Dans cette première séance, on introduit la description quantique d'une particule et on la compare avec la description classique. Puis on étudie quelques propriétés de l'équation de Shrödinger. On s'intéresse ensuite au formalisme des opérateurs linéaires et on reformule la description quantique dans ce cadre mathématique plus solide. Les états stationnaires d'une particule quantique sont étudiés, avant de terminer avec une première approche des mesures de quantités physiques dans un cadre quantique.

1 Description quantique d'une particule

On commence par fixer le cadre de la mécanique quantique, en détaillant la manière dont une particule quantique est décrite.

On considère une particule de masse m évoluant dans $\mathbb{R}^d$ sous l'influence d'un potentiel extérieur $V(\mathbf{x}, t)$.

Deux descriptions de la cinématique de cette particule sont possibles.

- En mécanique classique, l'état de la particule à l'instant t est donné par le vecteur position et le vecteur quantité de mouvement :

$$(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$$

  L'espace $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ prend alors le nom d'espace des phases.
- En mécanique quantique, l'état de la particule à l'instant t est donné par la *fonction d'onde*

$$\psi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{C}, \int_{\mathbb{R}^d} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} = 1$$

$|\psi(\cdot, t)|^2$ est une densité de probabilité. $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ représente donc la probabilité d'observer la particule au point $\mathbf{x}$ à l'instant t.

Remarque. *Le caractère probabiliste de la description quantique de la particule ne doit pas être interprété comme un manque d'information. La théorie quantique est intrinsèquement probabiliste.*

Proposition. *Pour toute fonction $\theta : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, les fonctions d'onde $\psi(\mathbf{x}, t)$ et $e^{i\theta(t)}\psi(\mathbf{x}, t)$ représentent le même état quantique.*

On dispose également de deux descriptions distinctes de la dynamique de la particule.

— En mécanique classique, la dynamique de la particule est décrite par le principe fondamental :

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}\mathbf{x}}{\mathrm{d}t}(t) = \dfrac{\mathbf{p}(t)}{m} \\ \dfrac{\mathrm{d}\mathbf{p}}{\mathrm{d}t}(t) = -\nabla_{\mathbf{x}} V(\mathbf{x}(t), t) \end{cases}$$

— En mécanique quantique, l'information sur la dynamique de la particule réside dans l'*équation de Schrödinger* par-rapport au temps :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t) + V\psi(\mathbf{x}, t) \tag{1}$$

On termine cette section en énonçant diverses quantités moyennes relatives à la particule.

— position moyenne :

$$< \mathbf{x} > (t) = \int_{\mathbb{R}^d} x |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}$$

— quantité de mouvement moyenne :

$$< \mathbf{p} > (t) = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(\mathbf{x}, t)} \left(-i\hbar \nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t)\right) \mathrm{d}\mathbf{x}$$

— énergie moyenne :

$$< E > (t) = \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}}_{\text{énergie cinétique}} + \underbrace{\int_{\mathbb{R}} V(\mathbf{x}, t) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}}_{\text{énergie potentielle}}$$

2 Propriétés de l'équation de Schrödinger

Dans cette section, on détaille quelques propriétés de l'équation de Schrödinger (1), utiles pour faire le lien entre les théories classique et quantique.

Proposition (Conservation de la masse)**.**

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} \right) = 0$$

Ce résultat nous assure que l'équation de Schrödinger est compatible avec le fait que $|\psi(\cdot, t)|^2$ est une densité de probabilité.

Remarque. *La preuve de ce résultat repose sur une technique d'intégration par parties, plus précisément sur la formule*

$$\int_{\mathbb{R}^d} \Delta_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} u(\mathbf{x}) \Delta_{\mathbf{x}} v(\mathbf{x}) \mathrm{d}\mathbf{x}$$

qui est valable uniquement pour des fonctions u et v dont les dérivées décroissent suffisamment vite à l'infini.

En dimension $d = 1$, la nullité des termes de bord de l'intégration par parties est assurée pour une particule confinée dans un puits infini.

Proposition (Relations d'Ehrenfest)**.**

$$\frac{\mathrm{d} < \mathbf{x} >}{\mathrm{d}t}(t) = \frac{< \mathbf{p} > (t)}{m}$$

$$\frac{\mathrm{d} < \mathbf{p} >}{\mathrm{d}t}(t) = -\int_{\mathbb{R}^d} \nabla_{\mathbf{x}} V(\mathbf{x}, t) |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} = - < \nabla_{\mathbf{x}} V(\mathbf{x}, t) > (t)$$

Remarque. *La preuve des résultats ci-dessus fait à nouveau appel à des intégrations par parties et plus précisément à la formule suivante :*

$$\int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{x}\Delta_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})\, v(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x} - \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{x} u(\mathbf{x})\, \Delta_{\mathbf{x}} v(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x} = -\int_{\mathbb{R}^d} \nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x})\, v(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^d} u(\mathbf{x})\, \nabla_{\mathbf{x}} v(\mathbf{x})\, \mathrm{d}\mathbf{x}$$

Les mêmes conditions que celles indiquées dans la remarque précédente sont nécessaires pour pouvoir utiliser cette formule.

Les deux résultats ci-dessus indiquent que les lois de la mécanique classique sont vérifiées « en moyenne » pour une particule quantique : la mécanique classique est donc en quelque sorte un cas particulier de la théorie quantique.

3 Reformulation opérationnelle

On expose à présent un cadre mathématique plus puissant qui repose sur la théorie des oéprateurs linéaires.

On peut voir la fonction d'onde $\psi : (\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \mapsto \psi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{C}$ comme une fonction $\Psi : t \in \mathbb{R} \mapsto \Psi(t) \in L^2\left(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}\right)$, où

$$\Psi(t) : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d \mapsto \psi(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{C}$$

Remarque. $\Psi(t)$ *appartient bien à l'espace* $L^2\left(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}\right)$ *puisqu'elle est de carré intégrable :* $\int_{\mathbb{R}^d} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} = 1 < +\infty$.

Avec ce nouveau formalisme, l'équation de Schrödinger (1) devient :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(t) = \hat{H}(t)\, \Psi(t) \tag{2}$$

avec $\hat{H}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x}, t)$ l'*opérateur hamiltonien quantique* sur l'espace $L^2\left(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}\right)$.

On peut redonner, avec ce nouveau cadre, les deux modes de description de la particule.

— En mécanique classique, l'état de la particule à l'instant t est donné par

$$\mathbf{Y}(t) = (\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$$

et l'information sur sa dynamique est contenue dans l'équation

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{Y}}{\mathrm{d}t}(t) = \mathbb{J}\nabla_{\mathbf{x}} H_{cl}(\mathbf{Y}(t))$$

où $H_{cl}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ est l'*opérateur hamiltonien classique* et $\mathbb{J} = \begin{pmatrix} 0_d & I_d \\ -I_d & 0_d \end{pmatrix}$.

— En mécanique quantique, l'état de la particule à l'instant t est entièrement contenu dans la fonction d'onde

$$\Psi(t) \in L^2\left(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}\right), ||\Psi(t)||_{L^2} = 1$$

et sa dynamique est donnée par

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(t) = \hat{H}(t)\, \Psi(t)$$

4 États stationnaires

Dans cette section, on considère un potentiel V indépendant du temps.

4.1 Théorie classique

En mécanique classique, les états stationnaires de la particule sont les couples $(\mathbf{x_0}, \mathbf{p_0}) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ solutions de

$$\begin{cases} \mathbf{p_0} = 0 \\ \nabla_{\mathbf{x}} V(\mathbf{x_0}) = 0 \end{cases}$$

On impose donc une vitesse nulle et on cherche $\mathbf{x_0}$ parmi les points critiques du potentiel V.

4.2 Théorie quantique

En mécanique quantique, un *état stationnaire* est un état de la forme :

$$\tilde{\Psi}(t) = e^{i\theta(t)}\Psi$$

Remarque. *Ici, on a donc Ψ indépendante du temps.*

En injectant $\tilde{\Psi}$ dans l'équation de Schrödinger (2), on obtient

$$i^2\hbar\dot{\theta}(t)\, e^{i\theta(t)}\Psi = \hat{H}\left(e^{i\theta(t)}\Psi\right)$$

Or, $\hat{H}$ est indépendant du temps. D'où

$$-\hbar\dot{\theta}(t)\,\Psi = \underbrace{\hat{H}(\Psi)}_{\text{indépendant du temps}}$$

Ainsi, $\exists \alpha \in \mathbb{R}$ telle que $\dot{\theta}$ est constante égale à α. On a donc

$$-\hbar\alpha\Psi = \hat{H}(\Psi)$$

En posant $E := -\hbar\alpha$ homogène à une énergie, les états stationnaires sont caractérisés par :

$$\begin{cases} \hat{H}(\Psi) = E\Psi \\ ||\Psi||_{L^2} = 1 \end{cases}, \theta(t) = -\frac{E}{\hbar}t + \theta_0$$

Finalement, la fonction d'onde d'un état stationnaire est de la forme

$$\tilde{\Psi}(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\Psi \tag{3}$$

avec

$$\hat{H}(\Psi) = E\Psi, ||\Psi||_{L^2} = 1$$

L'équation (3) est appelée *équation de Shrödinger stationnaire.*

5 Mesures de quantités physiques

On termine ce premier résumé avec quelques notions sur les mesures de quantités physiques relatives à une particule quantique.

On considère toujours une particule de masse m dans un potentiel stationnaire $V(\mathbf{x})$.

À toute grandeur physique scalaire, on associe un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H} := L^2\left(\mathbb{R}^d, \mathbb{C}\right)$ appelé *observable* associé à cette quantité physique.

Remarque. *Les grandeurs physiques scalaires considérées peuvent être la position de la particule selon l'axe $\mathbf{e_j}$, sa quantité de mouvement selon l'axe $\mathbf{e_j}$, son moment cinérique selon l'axe $\mathbf{e_j}$, son énergie, etc.*

Voici une liste de quelques opérateurs usuels :

- $\hat{x_j}$: opérateur de multiplication par x_j.
- $\hat{p_j} := -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x_j}$
- $\hat{L_j} := (\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \mathbf{e_j}$
- $\hat{H} := \dfrac{|\hat{\mathbf{p}}|^2}{2m} + V(\mathbf{x}) = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{x}} + V(\mathbf{x})$

Si à l'instant t le système est dans l'état $\Psi(t)$, la valeur moyenne de l'observable $\hat{A}$ à cet instant est donnée par $< \Psi(t)\,|\hat{A}|\Psi(t) >$. Ainsi,

- Position selon $\mathbf{e_j}$:

$$< x_j > (t) = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(\mathbf{x}, t)} x_j \psi(\mathbf{x}, t)\, \mathrm{d}\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^d} x_j |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}$$

- Quantité de mouvement selon $\mathbf{e_j}$:

$$< p_j > (t) = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(\mathbf{x}, t)} \left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}(\mathbf{x}, t)\right) \mathrm{d}\mathbf{x}$$

— Énergie :

$$< E > (t) = \int_{\mathbb{R}^d} \overline{\psi(\mathbf{x},t)} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x},t) + V(\mathbf{x},t)\, \psi(\mathbf{x},t) \right) \mathrm{d}\mathbf{x} =$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla_{\mathbf{x}} \psi(\mathbf{x},t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x} + \int_{\mathbb{R}^d} V(\mathbf{x},t)\, |\psi(\mathbf{x},t)|^2 \mathrm{d}\mathbf{x}$$

Ce premier résumé aura ainsi permis de poser le cadre général qui servira aux séances suivantes.