
Rappels sur la mécanique quantique

1.1 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.

1.2 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:

$$\square\phi = 0 \tag{1.1}$$

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

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

Une onde sera, alors, modélisée par une fonction ϕ , solution de l'équation (1.1). Une solution évidente de l'équation (1.1) est la fonction

$$\phi(x, t) = \phi_0 e^{i(k \cdot x - \omega t)} \tag{1.2}$$

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.

1.3 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

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx. \quad (1.3)$$

Ceci, impose que

$$\int_{R^3} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.4)$$

Le principe fondamental de la mécanique ondulatoire est énoncé 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

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi \quad (1.5)$$

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:

$$i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V\psi. \quad (1.6)$$

1.4 L'oscillateur harmonique

Cette partie sera traitée sous forme d'exercice (voir l'exercice 1).

1.5 Équation de Pauli

Cette partie sera traitée sous forme d'exercice (voir l'exercice 2).

1.6 Exercices d'application

Exercice 1 :

A l'instant t_0 , 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 $H_0 = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$ 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 2 :

1. En utilisant le produit des matrices de Pauli donné par les formules: $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + ie^{ijk}\sigma_k$, Montrer que:

$$(\vec{\sigma} \vec{A})(\vec{\sigma} \vec{B}) = \vec{A} \vec{B} + i \vec{\sigma} (\vec{A} \wedge \vec{B})$$

lorsque \vec{A} et \vec{B} commutent avec $\vec{\sigma}$.

2. Trouver la forme générale de l'équation de Pauli libre.