

# Mécanique Quantique

20x1.5h de Cours : Thierry Klein

[thierry.klein@grenoble.cnrs.fr](mailto:thierry.klein@grenoble.cnrs.fr) - 04 76 88 74 64

16x1.5h de TDs : Hermann Sellier & Arnaud Ralko

(contrôle continu : 20% de la note avec règle de max)

## seront traités :

Dualité onde-corpuscule et principe d'incertitude, paquets d'ondes,  
équation de Schrodinger,  
puits de potentiel, barrières, oscillateur harmonique,  
formalisme matricielle, bra-ket,  
moment cinétique et spin

## ne seront PAS traités :

méthodes perturbatives et variationnelle, théorie de la diffusion, règle d'or de  
Fermi, décohérence, matrice densité (M1), seconde quantification (M2)

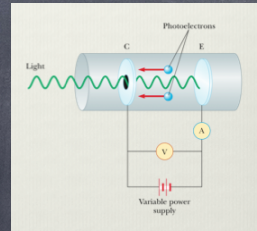
- 1675 : Théorie corpusculaire de la lumière (Newton) , mais Huygens (1677) établie théorie ondulatoire de la lumière
- 1687 : Newton : mécanique → espace des phases :  $r, p$
- 1865 : Maxwell : électro-magnétisme, semble confirmer l'approche d'Huygens (lumière = onde)
- 1866 : Physique statistique (Boltzmann, théorie cinétique) et thermodynamique (entropie,...)

**Kelvin 1857** : «la physique a fourni une description cohérente et complète de l'univers»

**Maxwell 1871** : «les hommes de sciences passeront leur temps à ajouter quelques décimales aux grandes constantes de la physique»

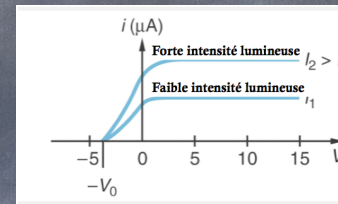
**Michelson 1903** : «les lois des sciences sont désormais si fermement établis que la possibilité qu'ils soient supplantés un jour est excessivement lointaine»





### XXe siècle : Philipp Lenard : effet photoélectrique :

théorie ondulatoire : l'électron se met à vibrer sous l'effet de l'onde EM et lorsqu'il a assez d'énergie il s'échappe



MAIS

il existe une fréquence seuil pour déclencher l'effet mais l'émission est instantanée

le potentiel d'arrêt est indépendant de l'intensité lumineuse  
(théorie ondulatoire intensité = énergie ?)

le nombre d'électrons émis (intensité) proportionnel à l'intensité lumineuse

Eistein introduit alors la notion de «quanta de lumière»

= PHOTON (corpuscule) d'énergie :

$$E = \hbar\omega \quad \text{et} \quad p = \hbar k$$

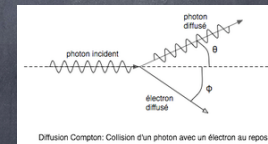
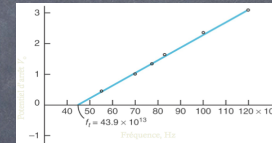
énergie des électrons arrachés (seuil) proportionnelle à la fréquence de la lumière

Après avoir obtenu la charge élémentaire de l'électron (expérience de la goutte d'huile 1910) Millikan, persuadé qu'Einstein avait tort, chercha à invalider sa proposition mais vérifera la linéarité du potentiel d'arrêt avec la fréquence (1916):

$$\text{pente} = \hbar/e$$

Cela permet d'expliquer l'effet Compton (1928)

$$\Delta\lambda \propto 1 - \cos(\theta)$$

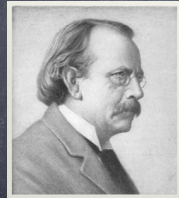


lumière = onde ET corpuscule

↓  
diffraction, interférences

↓  
discontinuité des échanges d'énergie

mais ceci est également vrai pour les ELECTRONS



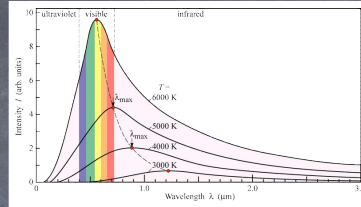
En 1906 J.J.Thomson montre que les rayons cathodiques sont constitués de "corpuscules" (les futurs électrons)

et 20 ans plus tard, G.P.Thomson montre que les électrons sont diffractés par une fente et sont donc des ondes (nous reviendrons sur ce point)



les deux reçurent le prix Nobel pour leur découverte

# Corps Noir



densité spectrale d'énergie : Wien 1896 :

description phénoménologique à haute fréquence

$$\rho(\omega, T) \propto \frac{\omega^3}{\exp(a\omega/T)}$$

Rayleigh-Jeans : quantification des modes  
E.M dans une cavité  $k = n\pi/a$

$$dN = 2 \times 4\pi k^2 dk / 8 \times (a/\pi)^3$$

$$\rho(\omega, T) = \frac{1}{V} \frac{dN}{d\omega} k_B T = \frac{k_B T \omega^2}{\pi^2 c^3}$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum \epsilon_n e^{-\epsilon_n/k_B T}}{\sum e^{-\epsilon_n/k_B T}} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

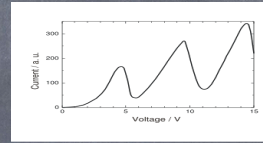
Planck  $\epsilon_n = n\hbar\omega$

permet de retrouver l'ensemble du spectre

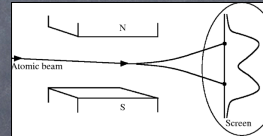


Apparition de «discontinuités» à l'échelle microscopique  
→ THEORIE DES QUANTA

expérience de Franck et Hertz (1914) :  
quantification du courant d'émission  
(= niveau d'énergie des électrons dans atomes)  
Série de Balmer etc...



expérience de Stern et Gerlach (1921) :  
quantification de l'orientation du moment  
magnétique des atomes



Sommerfeld : règle de quantification  
(pour tout couple de variables conjuguées de Lagrange E-t,...)

$$\oint p dq = nh$$

mais valable que pour les systèmes périodiques ?

De même en matière condensée :  
Chaleur Spécifique  
(au delà de la loi de Dulong-Petit)

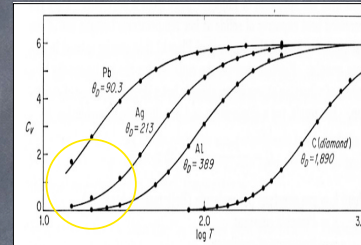
$$C \propto T^3$$

équivalent à la loi de Stephan  
du rayonnement du corps noir

$$E \propto T^4$$

quantification des modes de vibration du cristal  
= PHONONS

De même pour les **électrons** de conduction d'un métal  $C \sim T$   
et toutes leurs propriétés relèvent de la mécanique quantique  
(statistique différente de celle des photons, phonons car principe d'exclusion)



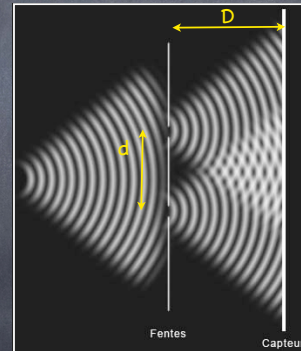
## -> mécanique ONDULATOIRE

lumière = onde ET corpuscule mais électrons : particule ou onde ?

caractère corpusculaire : matière constituée de «briques élémentaires» (atomes), découverte de l'électron par Rutherford en 1911,  
radioactivité : émission de particules (électron, Hélium)

Caractéristique première d'une onde :  
interférences entre ondes  
traversant 2 fentes (d'Young)

$$I = \cos^2\left(\frac{\pi}{\lambda} \frac{d}{D} x\right)$$



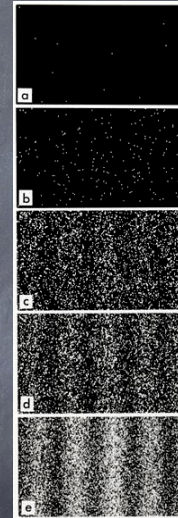
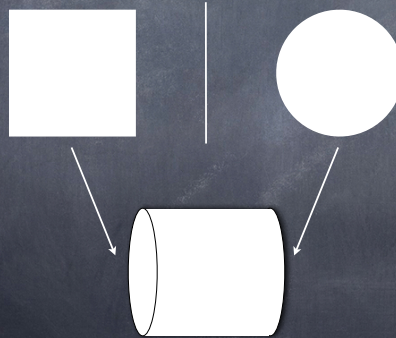
et en faisant une expérience identique avec des **électrons**....

De Broglie : généralisation de la dualité  
onde-corpuscule à tout objet microscopique

↓  
k,  $\omega$

↓  
m, p, E

$$E = \hbar\omega = h\nu \text{ \& } p = \hbar k = h/\lambda$$





interprétation **PROBABILISTE**

on peut définir des amplitudes de probabilité de passer par la fente 1 ( $\Phi_1$ ) ou la fente 2 ( $\Phi_2$ )

$$P_{12}(x) = |\Phi_1(x) + \Phi_2(x)|^2 = |\Phi_1(x)|^2 + |\Phi_2(x)|^2 + \underbrace{\Phi_1\Phi_2^* + \Phi_1^*\Phi_2}_{\text{interférences}}$$

si l'électron passait en 1 OU en 2  
le terme d'interférence n'existerait pas ( $P_{12} = P_1 + P_2$ )  
l'électron passe en 1 ET en 2  
**ONDE = densité de probabilité de présence**

La notion d'onde de probabilité a été initialement introduite par Bohr sous le terme de «champ guidé» (ou Einstein «champ fantôme»)

fonction scalaire des coordonnées de toutes les particules. Le mouvement d'une particule est régi par le principe de conservation de E et p (et les conditions aux limites) et est maintenu dans les limites imposées par le champ «guidé». La probabilité qu'une particule suive un chemin particulier est alors donnée par le carré du «champ guidé» (créé en quelque sorte par les autres particules)

Si une particule peut être dans un état  $\Phi_1$  ou dans un état  $\Phi_2$  elle peut également être dans l'état  $a_1\Phi_1+a_2\Phi_2$  : **principe de SUPERPOSITION**

le chat de Schrodinger

$$|\text{chat}\rangle = 1/\sqrt{2}(|\text{mort}\rangle + |\text{vivant}\rangle)$$

**est mort ET vivant**



sauf si on ouvre la boîte, dans quel cas on pourra voir s'il est mort OU vivant  
**la MESURE modifie l'état quantique !**

de la même façon

**peut-on «regarder» comment les électrons traverse les fentes ?**

**NON**

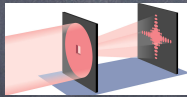
de plus, si une particule est alors localisée dans un intervalle  $\sim \Delta x$ , le «champ guidé» correspondant est créé par la superposition d'ondes planes (voir plus loin) distribuées sur une largeur  $\sim \Delta k$  tel que  $\Delta x \Delta k \sim 1$

$$\Delta x \times \Delta p \gtrsim \hbar/2$$

#### Principe d'incertitude d'HEISENBERG

on ne peut pas déterminer simultanément la position et l'impulsion avec une infinie précision : influence entre l'objet microscopique et «l'instrument» de mesure (= lumière)

Par exemple : fente de taille  $a = \Delta x$  alors  $\Delta p = p\alpha \sim p d/D$  taille ( $d$  de la tache centrale)



$$d \sim D \Delta p / p \sim D \hbar / a p \sim D \lambda / a$$

électron dans une boîte de taille  $a = \Delta x$   $\Delta E \sim p \Delta p / m > (\Delta p)^2 / m \sim \hbar^2 / m a^2$

Les énergies des états liés sont QUANTIFIÉES (discrets) → stabilité de la matière

$\sim 10$  eV pour  $a \sim 1\text{\AA}$

En résumé : les objets microscopiques ont un caractère corpusculaire et ondulatoire

l'état physique d'une particule peut alors être défini par une

«fonction d'onde (de probabilité)»

qui est perturbée par la mesure (!)

Le résultat de cette mesure est probabiliste

[mais attention la fonction d'onde est elle parfaitement bien connue :

$\Phi = \exp(ikx)$  dans le vide]

Il n'y a aucun lien de causalité entre les états avant et après la mesure

et certaines propriétés sont NON LOCALES (la particule peut être simultanément en tout point de l'espace !)

de plus les variables conjuguées ( $p-x$ ,  $E-t$ )

ne peuvent pas être déterminés simultanément avec une infinie précision



## Postulats de la MQ

- ⦿ P1. La connaissance de l'état quantique (à  $t_0$ ) est **complètement** contenue dans un «vecteur» d'un espace de Hilbert de dimension (in)finie (= fonction d'onde)
- ⦿ P2. A toute propriété **observable** (position, énergie,...) est associée un opérateur (A) agissant sur les «vecteurs» (sous espace) définis en P1.
- ⦿ P3. Une **mesure** de la grandeur physique associée à A ne peut donner qu'une **valeur propre** de A
- ⦿ P4. Le résultat de cette mesure est alors **probabiliste** (et la moyenne de A doit respecter le principe d'incertitude)
- ⦿ P5. Après la mesure, l'état du système est **projeté** dans le sous-espace engendré par les vecteurs propres associés à la valeur propre mesurée
- ⦿ P6. L'évolution temporelle du système est **totalement déterminée** par **l'équation de Schrodinger**

- P1+P6 semble incompatible avec P5 (et P4)
- Comment passe-t-on de  $0 < P < 1$  (P3) à  $P=0$  ou  $1$  (P5)

La MQ ne permet pas décrire totalement la réalité car elle est incomplète (**variables cachées**). Influence de la **conscience** dans P5 «troublante» (dans quel état était l'univers quand il n'y avait personne pour l'observer ?)

La MQ décrit parfaitement la réalité mais P5 n'existe pas : en faisant la mesure nous ne «voyons» qu'une partie de l'état quantique (bien que la totalité existe dans un «multivers») ou certains états disparaissent rapidement mais pas instantanément (lors de la mesure ou avant) du fait du couplage avec l'environnement (**décohérence**)

OU

Interprétation de Coppenhague (Bohr) : la MQ n'a pas pour vocation de décrire la «réalité» (?) mais de prédire le résultat de tout ce que l'on peut mesurer.

# Chapitre 1

## Les postulats de la mécanique quantique

Paquets d'ondes  
Principe d'incertitude  
Equation de Schrodinger

**Postulat 1** : Fonction d'onde : densité de probabilité de trouver la particule dans un volume  $dV$  :

$$w(x) = |\Phi(x)|^2$$

Onde plane  $\Phi_k(x) = e^{i(kx - \omega t)}$   
 = délocalisée dans tout l'espace (MAIS pas de carrée sommable)

$$\rightarrow \Phi(x) = \sum a_k \Phi_k(x)$$

ou en «somme continue»  $\Phi(x) = 1/\sqrt{2\pi} \int \psi(k) \Phi_k(x) dk$

$$\Phi(x) = \text{TF de } \Psi(k) \quad = \text{Paquets d'ondes}$$

La largeur de la distribution en  $x$  est relié à celle de  $\Psi(k)$  par le principe d'incertitude  $\Delta x \Delta k \sim 1$

exemple : paquets d'ondes Gaussien  
 (voir TD)

$$\Phi(x) = (1/\sqrt{2\pi}a)^{1/2} e^{-x^2/4a^2} e^{ik_0 x}$$

$$\psi(k) = \sqrt{2a}(1/2\pi a^2)^{1/4} e^{-a^2(k-k_0)^2}$$



Fonction	TF
1	$\delta(k) *$
$e^{ik_0 x}$	$\delta(k - k_0)$
carrée (largeur 1)	$\text{sinc}(\pi k)$
triangle (+/-1)	$\text{sinc}^2(\pi k)$
$\exp(- x )$	$\frac{1}{1 + k^2}$

\* ou la fonction de Dirac est définie par :  $\delta(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sin(nx)}{\pi x}$

$$TF[af(x) + bg(x)] = a \times TF[f(x)] + b \times TF[g(x)]$$

$$TF[ixf(x)] = \frac{dTF[f(x)]}{dk}$$

$$TF\left[\frac{f(x)}{dx}\right] = -ik \times TF[f(x)]$$

$$TF[f(x + \xi)] = TF[f(x)] \times e^{-ik\xi}$$

On peut définir un PRODUIT SCALAIRE  
(espace de Hilbert)  $\langle \Psi, \Phi \rangle = \int \psi(x)^* \Phi(x) dx$

$$|\Phi|^2 = \langle \Phi, \Phi \rangle = \int \Phi^*(x) \Phi(x) dx$$

et à toute grandeur physique est associée une  
OBSERVABLE (postulat 2) = opérateur A de moyenne :  $\langle A \rangle = \int \Phi(x)^* A[\Phi(x)] dx$

Les opérateurs seront LINEAIRES

$$A(\alpha_1 \Phi_1 + \alpha_2 \Phi_2) = \alpha_1 A(\Phi_1) + \alpha_2 A(\Phi_2)$$

et hermitique (auto-adjoint)  $\int \Phi_1^* A(\Phi_2) dx = \int (A\Phi_1)^* \Phi_2 dx$

=> les moyennes sont alors REELLES

$$\text{On note } \Delta a = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

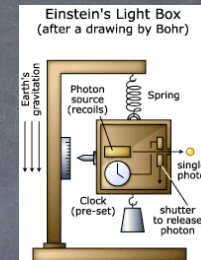
Soit  $F(x) = (x - \langle x \rangle) \Phi(x)$  et  $|F(x)| = [\int |F(x)|^2 dx]^{1/2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = \Delta x$   
 $G(p) = i(p - \langle p \rangle) \psi(p)$   $|G(p)| = \Delta p$

$$\text{on (re)trouve alors } \Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

De même on peut montrer que  $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$

Si une particule (libre) se déplace à une vitesse  $v$  et on cherche le temps  $t$  auquel elle passe en un point  $x$  alors ce temps peut être obtenu avec une incertitude  $\Delta t = \Delta x / v$   
de même son énergie ( $p^2/2m$ ) est définie à  $\Delta E = v \Delta p$  donc on retrouve bien ici  $\Delta p \Delta x = \Delta E \Delta t$

-> polémique Bohr - Einstein



## Résultats possibles d'une mesure

La mesure de la grandeur physique donnera une valeur propre de A (**postulat 3**)  
l'ensemble des valeurs propres peut être discret (énergie) ou continu (position)

si  $\Phi$  est un **état propre** de A ( $\Phi_n$  de valeur propre  $a_n$ )

alors la mesure est parfaitement définie ( $\Delta a = 0$ ) et sera égale à  $a_n$  (et  $\langle A \rangle = a_n$ )  
et la réciproque est vraie

Deux fonctions d'ondes associées à des valeurs propres différentes sont orthogonales

Si plusieurs fonctions d'ondes correspondent à une même valeur propre  
on dit qu'il y a **dégénérescence**

Si  $\Phi$  n'est pas un état propre mais  
 $\Phi = \sum c_n \Phi_n$  et  $\langle A \rangle = \sum a_n |c_n|^2$   
 alors la mesure donnera  $a_n$  avec la probabilité  
 $|c_n|^2 = |\langle \Phi_n, \Phi \rangle|^2$  (postulat 4)

Remarque 1 : pour l'opérateur position  $\Phi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$

-> décomposition de  $\Phi$  sur les  $\Phi_{x_0}$  (et non pas en ondes planes)

$$\Phi(x) = \int \Phi(x_0) \delta(x - x_0) dx_0$$

$w(x_1)$  : densité de probabilité de trouver la particule en  $x_1$

$$\begin{aligned} w(x_1) &= |\Phi(x_1)|^2 = \left| \int \Phi(x_0) \delta(x_1 - x_0) dx_0 \right|^2 \\ &= \left| \int \Phi(x) \delta(x_1 - x) dx \right|^2 = \left| \int \Phi_{x_1}(x) \Phi(x) dx \right|^2 = |\langle \Phi_{x_1}, \Phi \rangle|^2 \end{aligned}$$



Remarque 2 :  $c_n = \int \Phi(x) \Phi_n^*(x) dx$

$$\Phi(x) = \sum \left( \int \Phi(x') \Phi_n^*(x') dx' \right) \Phi_n(x)$$

$$\Phi(x) = \int \left( \sum \Phi_n(x) \Phi_n^*(x') \right) \Phi(x') dx'$$

$$\sum \Phi_n(x) \Phi_n^*(x') dx' = \delta(x - x') \quad \text{Relation de fermeture}$$

Juste après la mesure la particule se trouve dans l'état  $\Phi_n$  (postulat 5)

Soit 2 opérateurs dont on cherche à déterminer les grandeurs associées (a et b)

on peut alors définir le (opérateur) COMMUTEUR  $AB - BA = [A, B]$

(et on appelle «reste de commutation»  $C = -i[A, B]$ )

$[A, B] = 0 \Leftrightarrow A$  et  $B$  ont les mêmes vecteurs propres

et  $\Delta a \Delta b = 0$  et les grandeurs physiques associées (a et b) peuvent alors être déterminées simultanément avec une infinie précision

inversement, on ne peut PAS connaître simultanément les quantités physiques associées à 2 opérateurs ne commutant pas avec une précision infinie

$$\langle p \rangle = \hbar \int \psi^*(k) k \psi(k) dk = \int \Phi^*(x) \frac{\hbar \nabla}{i} [\Phi(x)] dx$$

$$\text{opérateur } p \Leftrightarrow \frac{\hbar \nabla}{i}$$

$$[x, p_x] = i\hbar$$

on remarque donc que  $\Delta x \Delta p \geq | \langle C \rangle | / 2$

On peut montrer que ceci est un résultat général :  $\Delta a \Delta b \geq | \langle C \rangle | / 2$

remarque : pour l'opérateur position  $\Phi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$

et  $\Phi_{p_0}(x) = (1/\sqrt{2\pi\hbar}) e^{ip_0 x/\hbar}$

vecteurs propres différentes d'où  $\Delta x \Delta p$  non nul

## Quelques opérateurs

Observable	Opérateur
position, $x$	$x$
quantité de mouvement, $p$	$\hbar \nabla / i$
Energie cinétique, $T=p^2/2m$	$(1/2m)(\hbar \nabla / i)^2 = -\hbar^2/2m \Delta$
Moment cinétique, $r \times p$	$-i\hbar r \times \nabla$

par exemple pour l'état 1s de l'atome d'hydrogène

$$\langle T \rangle = - \langle V \rangle / 2 = me^4 / 2\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2$$

Energie totale : <b>HAMILTONIEN=H</b>	$-\hbar^2/2m \Delta + V$
---------------------------------------	--------------------------

$$\omega \leftrightarrow E/\hbar \quad \Phi_k(x) = e^{i(kx - \omega t)} = e^{i(px - Et)/\hbar}$$

$$\langle \Phi, (i\hbar \partial / \partial t) \Phi \rangle = i\hbar \int \Phi^* \partial \Phi / \partial t dx = \int E |\Phi|^2 dx$$

$$\langle \Phi, (-\hbar^2/2m \Delta) \Phi \rangle = \int (p^2/2m) |\Phi|^2 dx$$

$$H\Phi = i\hbar\partial\Phi/\partial t \quad \text{Equation de Schrodinger}$$

Si  $H$  ne dépend pas du temps (système conservatif), on peut chercher  $\Phi$  sous la forme

$$\Phi(x, t) = \psi(x)\chi(t)$$

avec  $\chi(t) = e^{-iEt/\hbar}$  et  $H\psi = E\psi$

et si  $\Phi(x, t=0) = \sum c_n(0)\Phi_n$  avec  $H\Phi_n = E_n\Phi_n$

alors

$$\Phi(x, t) = \sum c_n(0)e^{-iE_nt/\hbar}\Phi_n$$

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle$$



En mécanique classique (analytique)  $\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial F}{\partial p} \dot{p}$

$$\text{et } \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{d'où} \quad \frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + \{F, H\}$$

crochet de Poisson

théorème d'Ehrenfest

$$\frac{d \langle x \rangle}{dt} = \langle \frac{p_x}{m} \rangle = \langle v_x \rangle \quad \frac{d \langle p_x \rangle}{dt} = - \langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = \langle F_x \rangle$$

équivalent aux équations du mouvement de la mécanique classique mais sur les VALEURS MOYENNES

Remarque : le paquet d'onde se déplace avec la vitesse de GROUPE  $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}(k_0)$

qui peut-être différent de la vitesse de PHASE de chaque composante  $v_\phi = \frac{2}{\hbar} \frac{E}{k}$

si  $H$  ne dépend pas de  $t$ , l'énergie est une constante du mouvement

si  $V$  ne dépend pas de  $x$ ,  $p_x$  est une constante du mouvement

et on verra plus tard que si  $V$  ne dépend que de  $r$  (potentiel central), le moment cinétique ( $L^2$ ) est une constante du mouvement (seconde loi de Kepler)

electrodynamique : conservation de la charge  
Si la charge varie dans un élément de volume,  
alors un courant s'écoule à travers la surface  
qui entoure cet élément

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \text{div}(j_e) = 0$$

Courant de probabilité

$$\vec{J} = \frac{\hbar}{2mi} [\Phi^* \vec{\nabla} \Phi - \Phi \vec{\nabla} \Phi^*]$$

si  $\Phi = \Phi_0 e^{i(px - Et)/\hbar}$  alors  $\vec{J} = \frac{|\Phi_0|^2 \vec{p}}{m} = |\Phi_0|^2 \vec{v}$

équation de conservation  $\frac{\partial |\Phi|^2}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = 0$

### Quelques remarque sur la mécanique quantique RELATIVISTE

Klein-Gordon ont cherché à formuler une équation permettant de reproduire l'équation relativiste

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = \hbar^2 c^2 \Delta \Phi + m^2 c^4 \Phi$$

mais on peut montrer que les solutions de cette équation ne permettent pas d'avoir l'équation de conservation de  $\omega = |\Phi(x)|^2$

mais de  $\omega = \frac{i\hbar}{2m} [\Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} - \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t}]$  qui peut être négatif, interprétation ?

Equation de DIRAC : 1er ordre

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = i\hbar c (\vec{\alpha} \vec{\nabla}) \Phi + mc^2 \beta \Phi$$

où les composantes de  $\vec{\alpha}$  (et  $\beta$ ) sont des matrices (de Pauli) et  $\Phi$  = quadrivecteur  
-> théorie quantique des champs

## Chapitre 2

### Notation de Dirac Représentation matricielle

bra-ket  
projecteur



$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ikx} \Psi(k) dk$	ondes planes = états propres de T
$\int \Phi(x') \delta(x - x') dx'$	fonctions de Dirac = états propres de X
$\sum c_n \Phi_n$	états propres de H (ou tout autre opérateur formant une base)
$u_k(x) e^{ikx}$	fonctions de Bloch = états propres de l'opérateur translation (potentiel périodique)

Remarque : la fonction d'onde est CONTINUE et (généralement) DERIVABLE (sauf potentiel infini)

La physique ne doit pas dépendre de la base choisie et certains états quantiques (spin par exemple) ne peuvent pas être définis à partir d'une fonction  $\Phi(x)$   
 → généralisation de la notation

### Notation de Dirac

espace des «ket» :  $|n\rangle$

un état est alors également être défini par un  
**vecteur «colonne»** (de dimension (in)finie)  
dont les composantes dépendent de la base (=jeu de ket) choisie

$$|\Phi\rangle = \sum c_n |n\rangle \quad |\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_n \\ \dots \end{pmatrix}$$

espace des «bra» :  $\langle n|$

espace dual : **vecteur «ligne»** (de même dimension)

$$\sum \lambda_n |n\rangle \longrightarrow \sum \lambda_n^* \langle n|$$

$$\langle \Phi| = (\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_n^*, \dots)$$

produit scalaire

$$\langle n|m \rangle = \langle m|n \rangle^*$$

norme

$$\sqrt{\langle n|n \rangle}$$

inégalité Cauchy-Schwartz

$$|\langle n|m \rangle|^2 \leq \langle n|n \rangle \langle m|m \rangle$$

par exemple dans l'espace des positions, on a comme précédemment

$$\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \int \Phi_1^* \Phi_2 dx$$

mais la notation est générale à toute espace (de Hilbert sauf pour états propres non normables) engendré par les vecteurs propres d'un opérateur A

$$|x_0 \rangle \leftrightarrow \delta(x - x_0)$$

$$\langle x | \Phi \rangle = \Phi(x) \quad \text{et} \quad \langle p | \Phi \rangle = \psi(p)$$

$$\langle x | p \rangle = 1/\sqrt{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar}$$

moyenne  $\langle A \rangle = \langle \Phi | A | \Phi \rangle$   
 au ket  $|A| \Phi \rangle$  est associé le bra  $\langle \Phi | A^\dagger$

$A^\dagger$  = opérateur adjoint de A

$$\langle \Phi_1 | A | \Phi_2 \rangle^* = \langle \Phi_2 | A^\dagger | \Phi_1 \rangle$$

$$(cA)^\dagger = c^* A^\dagger \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

Observable : opérateur hermitique (auto-adjoint) :  $A^\dagger = A$ ,  
 et les spectres des valeurs propres (réelles) de A et  $A^\dagger$  sont identiques

A = matrice

Dans la base des états propres de A

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

$$\text{et } A_{ij}^\dagger = A_{ji}^*$$



Comme précédemment l'ensemble des ket associée à des valeurs propres distincts sont orthogonaux

Si A est un observable, l'ensemble de ces états propres  $|\alpha_i\rangle$  forme une base et vérifie la relation de fermeture

$$\sum |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = 1 \quad (\text{opérateur identité})$$

$|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$  est le **projecteur** sur l'état  $|\alpha_i\rangle$  (noté  $P_{\alpha_i}$ )

(où plus généralement le projecteur dans le sous espace engendré par les vecteurs propres associés à  $a_i$  si la valeur propre est dégénérée)

\* l'observable

$$A = \sum P_{\alpha_i} a_i$$

\* la probabilité d'obtenir  $a_i$  est  $\langle\Phi|P_{\alpha_i}|\Phi\rangle = |\langle\Phi|\alpha_i\rangle|^2$

\* après la mesure le système est dans l'état  $\frac{P_{\alpha_i}|\Phi\rangle}{\|P_{\alpha_i}|\Phi\rangle\|}$   
( $|\alpha_i\rangle$  si l'état est non dégénéré)

On appelle ECOC un jeu d'opérateurs  $A, B, C, \dots$  qui commutent 2 à 2 s'il existe une base d'états propres unique à tous les opérateurs

Toutes les grandeurs physiques associées peuvent alors être mesurées indépendamment (et avec précision infinie)

Sur la base propre d'un ECOC

$$|\Phi(t)\rangle = \sum c_n(t) |\alpha_n\rangle$$

et l'évolution temporelle est donnée par l'équation de Schrodinger

$$i\hbar \frac{d|\Phi\rangle}{dt} = H|\Phi\rangle$$

$$\text{soit } i\hbar \frac{\partial c_n}{\partial t} = \sum H_{nm} c_m \quad \text{avec} \quad H_{nm} = \langle \alpha_n | H | \alpha_m \rangle$$

$$\text{Si } |\alpha_n\rangle \text{ est un état propre de } H : |\Phi(t)\rangle = \sum e^{-iE_n t/\hbar} c_n(0) |\alpha_n\rangle$$

matrice S :  $|\Phi(r, t)\rangle = S(t)|\Phi(r, 0)\rangle$

$$S = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) = \sum \frac{1}{n!} \left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)^n$$

Sur la base propre de H :

$$S = \begin{pmatrix} \exp(-iE_0t/\hbar) & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & \exp(-iE_1t/\hbar) & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \exp(-iE_nt/\hbar) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Remarque : En notant  $S_{nm} = \langle \varphi_n | S | \varphi_m \rangle$

$|S_{nm}|^2$  est la probabilité de passer de l'état n à l'état m au bout du temps t sous l'influence de H

## Chapitre 3

### Quelques exemples simples

Puits de potentiel (fini)  
Transmission-Réflexion sur une barrière  
Oscillateur harmonique

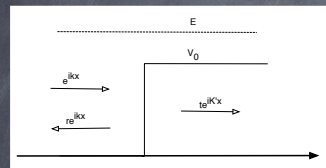


$$V = V_0 \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + V_0 \Phi = E \Phi$$

$$E > V_0$$

$$\Phi = \Phi_0 e^{\pm i K' x}$$

$$K' = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}$$



$$k = \sqrt{2m(E)/\hbar^2}$$

$$r = \frac{k - K'}{k + K'} \quad t = \frac{2k}{k + K'}$$

$$R = |r|^2 \text{ et } T = \frac{K'}{k} |t|^2$$

$$\vec{J}_i + \vec{J}_r = \vec{J}_t$$

de façon générale

$$\Phi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\Phi_{II} = C e^{iK'x} + D e^{-iK'x}$$

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \tau \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

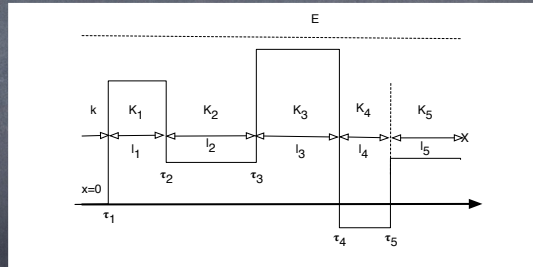
avec  $\tau = \begin{pmatrix} \frac{k+K'}{2k} & \frac{k-K'}{2k} \\ \frac{k-K'}{2k} & \frac{k+K'}{2k} \end{pmatrix}$

et  $\tau = \begin{pmatrix} \frac{k+K'}{2K'} & \frac{K'-k}{2K'} \\ \frac{K'-k}{2K'} & \frac{k+K'}{2K'} \end{pmatrix}$  pour une chute de potentiel

et si la discontinuité a lieu en  $l$  et non pas en  $0$

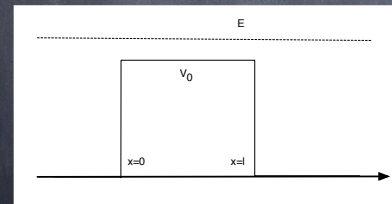
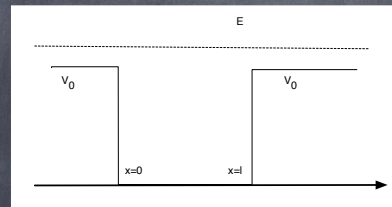
$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-ikl} & 0 \\ 0 & e^{ikl} \end{pmatrix} \tau \begin{pmatrix} e^{iK'l} & 0 \\ 0 & e^{-iK'l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C' \\ D' \end{pmatrix}$$

et si :



$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \tau_1 \begin{pmatrix} e^{-iK_1 l_1} & 0 \\ 0 & e^{iK_1 l_1} \end{pmatrix} \tau_2 \begin{pmatrix} e^{-iK_2 l_2} & 0 \\ 0 & e^{iK_2 l_2} \end{pmatrix} \dots \tau_5 \begin{pmatrix} e^{-iK_5 l_5} & 0 \\ 0 & e^{iK_5 l_5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

dans le cas particulier (voir TD) où



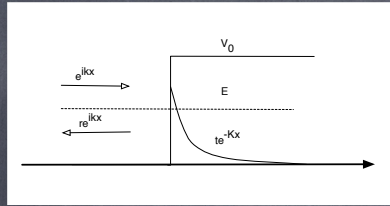
$$T = \frac{4k^2 K'^2}{4k^2 K'^2 + (k^2 - K'^2)^2 \sin^2 kl}$$

$$T = 1 \text{ pour } kl = n\pi$$

Effet Ramsauer-Townsend : diffusion  
d'un électron par un gaz rare  
(potentiel analogue à un puits)

$$K' \leftrightarrow k$$

$$T = \frac{4K'^2 k^2}{4K'^2 k^2 + (K'^2 - k^2)^2 \sin^2 K'l}$$



$$E < V_0$$

$$K = \sqrt{2m(V_0 - E)/\hbar^2}$$

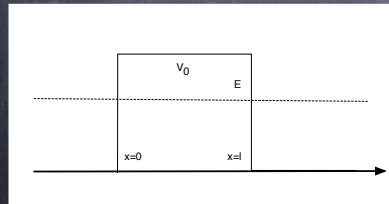
idem  $E > V_0$  avec  $K' \rightarrow iK$

$$r = \frac{k - iK}{k + iK} \quad t = \frac{2k}{k + iK}$$

$$R = |r|^2 = 1$$

mais probabilité non nulle dans la région II sur  $d \sim 1/K$

l'onde «resort» de la région II avec un déphasage  $\varphi$  ( $r = e^{i\varphi}$ )



$$T = \frac{4k^2 K'^2}{4k^2 K^2 + (K^2 + k^2)^2 \sinh^2 Kl}$$



T est NON NULLE (quelle que soit l et  $V_0$ )  
= effet tunnel

si  $Kl \gg 1$   $T \propto e^{-2Kl}$

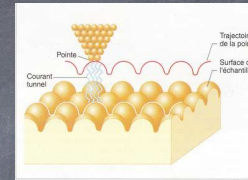
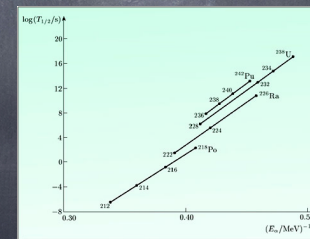
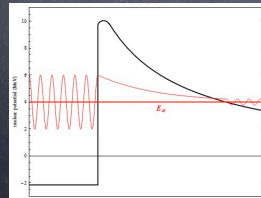
de façon générale pour  $V(x)$  i.e.  $K(x)$

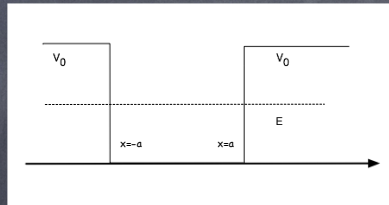
$$T \propto e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} K(x) dx}$$

exemple : radioactivité  $\alpha$

loi de Gamov-Condon-Gurney

$$\ln T = a + B/\sqrt{E}$$





Conditions de continuité de  
et  $\psi'$  en  $x=a$  et  $x=-a$   
(attention changement ordonnées)

$$K = k \tan(ka) \quad \text{ou} \quad K = -k / \tan(ka)$$

( paire) ( impaire)

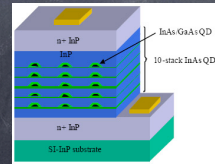
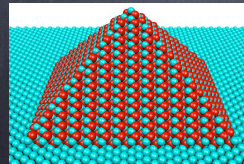
$k$  et donc  $E$  sont discrets (quantification)

Il existe au moins une solution (état fondamentale) (voir TD pour puits infini)

La première solution est paire puis les suivantes sont  
alternativement impaires et paires

«boite» quantique à 3D = hétérostructure semiconductrice

$\Leftrightarrow$  atome mais 100x plus grand



pyramide InAs sur (dans) GaAs  
ajustement des raies spectrales  
 $\Rightarrow$  diode laser, LEDs

Oscillateur Harmonique (voir aussi TD)  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$

- mode collectif de vibration dans les solides (phonons)
- mouvement d'un électron dans un champ (niveau de Landau  $\omega = qB/m$ )
- distribution du champ dans un supraconducteur (type II) ....

$$\kappa = \frac{E}{\hbar\omega} \quad \lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \quad y = \lambda x^2 \quad \Psi(y) = e^{-y/2} \varphi(y)$$

$$y \frac{d^2 \varphi}{dy^2} + \left(\frac{1}{2} - y\right) \frac{d\varphi}{dy} + \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{4}\right) \varphi = 0$$

Equation différentielle de KUMMER (hypergéométriques confluentes)

$$\kappa - \frac{1}{2} = n \quad (\text{voir TD})$$

-> Polynômes d'Hermite  $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n}$

Propriétés :  $\frac{\partial H_n}{\partial \xi} = 2nH_{n-1}$ ,  $H_{n+1} = 2\xi H_n - 2nH_{n-1}$  et  $\frac{\partial^n H_n}{\partial \xi^n} = 2^n n!$

avec  $\xi = \sqrt{\lambda}x \longrightarrow H_0 = 1, H_1 = 2\xi, H_2 = 4\xi^2 - 2, H_3 = 8\xi^3 - 12\xi, \dots$

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \Psi = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda}x)$$

Probabilité de présence  $|\Psi_n|^2 \longleftrightarrow \omega_{cl} = \frac{1}{\pi a} \frac{1}{\sqrt{1 - (x/a)^2}}$

Energie de «point zéro» :  $E_0 = \hbar\omega/2 \longleftrightarrow$  Heisenberg

On peut montrer que

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi})\Psi_n = \sqrt{n}\Psi_{n-1}}_{\substack{\mathbf{a} \\ \text{Annihilation}}} \quad \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi})\Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}}_{\substack{\mathbf{a}^+ \\ \text{Création}}}$$

et  $a^+ a |\Psi_n\rangle = n |\Psi_n\rangle \quad H = \hbar\omega(a^+ a + 1/2)$

$$\langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle = \hbar\omega(n + 1/2)$$



et à 3D 
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\omega^2}{2}r^2$$

POTENTIEL CENTRAL

avec 
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$$
 où  $L^2$  est le moment cinétique  
(dérivées en  $\varphi$  et  $\theta$ )

on note  $Y_{lm}$  les états propres de  $L^2$   
(= harmoniques sphériques, voir chapitre 4)

$$\Psi_{n,l,m} = \exp(-\lambda r^2/2) \times r^l \cdot v(r) \times Y_{lm}(\varphi, \theta)$$

et comme à 1D,  $v(r)$  est solution d'une équation de KUMMER

$$y \frac{d^2 v}{dy^2} + \left(l + \frac{3}{2} - y\right) \frac{dv}{dy} + \left(\frac{\kappa}{2} - \frac{1}{2}\left(l + \frac{3}{2}\right)\right)v = 0 \quad (y = \lambda r^2)$$

$$E_{n,l} = \hbar\omega(2n + l + 3/2)$$

particules dans un champ magnétique

$$H = \frac{1}{2m} [\vec{p} - q\vec{A}]^2 + V$$

à partir des équations  $\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}$  et  $\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x}$   
on peut montrer que cet Hamiltonien correspond  
bien à une force :  $\vec{F} = q(\vec{\epsilon} + \vec{v} \times \vec{B})$

$$\text{avec } \vec{\epsilon} = -\vec{\nabla}\left(\frac{V}{q}\right) - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \text{et} \quad \vec{B} = -\vec{\nabla} \times \vec{A}$$

si  $B = B_z$  on peut prendre  $A = A_y = B.x$

il apparaît alors un terme :  $(1/2).(q^2 B^2/m).x^2$  dans H

et les énergie sont donc sous la forme

$$E = \hbar\omega(n + 1/2) \text{ avec } \omega = \sqrt{k/m} = eB/m$$

niveaux de Landau

fréquence cyclotron

## Chapitre 4

### Moment cinétique

définition, valeurs propres  
opérateurs  $L_+$  et  $L_-$   
représentation matricielle

Spectre molécule diatomique  
Atome d'Hydrogène

## Moment cinétique

$$L_x = yp_z - zp_y = -i\hbar(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y}) = i\hbar(\frac{\cos\theta}{\tan\varphi} \frac{\partial}{\partial\theta} + \sin\theta \frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$L_y = zp_x - xp_z = -i\hbar(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z}) = i\hbar(\frac{\sin\theta}{\tan\varphi} \frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\theta \frac{\partial}{\partial\varphi})$$

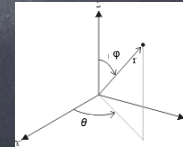
$$L_z = xp_y - yp_x = -i\hbar(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\theta}$$

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 r^2 \times \text{partie angulaire de } \Delta$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2 \tan\varphi} \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{r^2 \sin^2\varphi} \frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (\text{et permutation x,y,z})$$

$$[L_x, L^2] = [L_y, L^2] = [L_z, L^2] = 0$$





$L^2$  et  $L_z$  (par exemple) ont même vecteurs propres  
= HARMONIQUES SPHERIQUES ( $Y_{l,m}$ )

notées  $|l, m\rangle$

$$L^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}$$

$$L_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m}$$

$$L_+ = L_x + iL_y \quad L_- = L_x - iL_y$$

$$L_+^\dagger = L_- \quad [L^2, L_\pm] = 0 \quad [L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$$

$$L_\pm |l, m\rangle \propto |l, m \pm 1\rangle$$

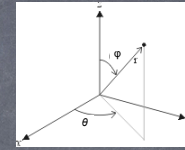
$$\|L_\pm |l, m\rangle\| = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}\hbar$$

$$-l \leq m \leq l \quad \text{et } l \text{ est demi-entier}$$

$$L_z |l, m\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle$$

$$\langle \varphi, \theta | l, m \rangle = Y_{l,m}(\varphi, \theta) = f_{l,m}(\varphi) e^{im\theta}$$

**m et donc l sont des ENTIERS**  
(voir SPIN = demi-entier)



$$L_{\pm} = \hbar e^{\pm i\theta} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \cotan(\varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

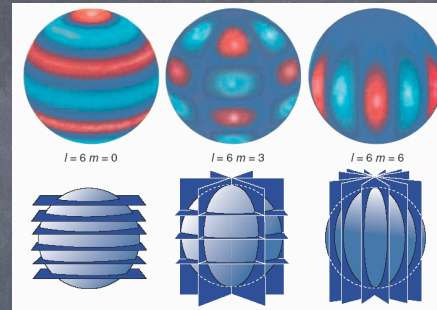
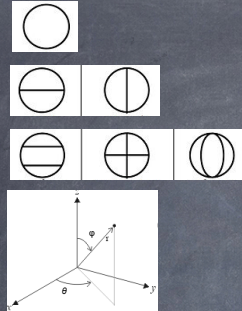
$$L_+ |l, l\rangle = 0 \quad \text{donc} \quad f_{l,l}(\varphi) = c_l (\sin \varphi)^l$$

$$\text{et en normant : } c_l = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

Il suffit alors d'appliquer  $L_-$  pour trouver  $f_{l,l-1}$  etc...

$$\text{Par exemple } Y_{2,\pm 2} = \sqrt{15/32\pi} \sin^2 \varphi e^{\pm 2i\theta}$$

$$Y_{2,\pm 1} = \sqrt{15/8\pi} \cos \varphi \sin \varphi e^{\pm i\theta} \text{ et } Y_{2,0} = \sqrt{5/16\pi} (3 \cos^2 \varphi - 1)$$



remarque

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\varphi) e^{im\theta}$$

$P_l$  = polynôme de LEGENDRE

$$P_l^m(x) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}(x^2-1)^l}{dx^{l+m}} = (-1)^m (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(x)}{dx^m}$$

$$\int Y_{l,m} Y_{l',m'}^* d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad \sum Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l',m'}^*(\theta', \varphi') = \delta(\theta - \theta') \delta(\varphi - \varphi')$$

### Remarque 1 : représentation matricielle

exemple  $l=1$  : 3 états propres de  $L^2$  et  $L_z$  :  $|1, 1\rangle$ ,  $|1, 0\rangle$  et  $|1, -1\rangle$

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad L_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_x = (L_+ + L_-)/2 = \hbar/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L_y = (L_+ - L_-)/2i = \hbar/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Quelles sont les valeurs propres de  $L_x$  (et  $L_y$ ) ?

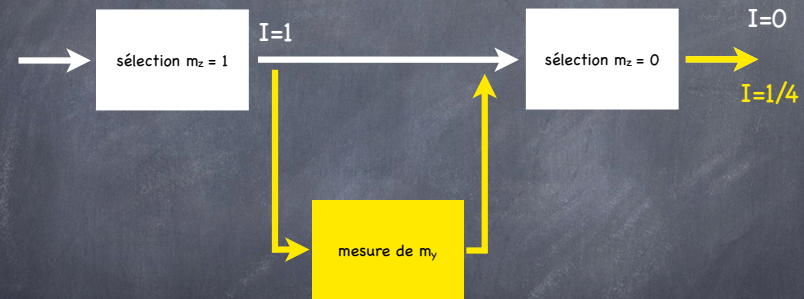
EVIDEMMENT -1, 0, 1 (le choix de l'axe z est arbitraire)

et les vecteurs propres associés (pour  $L_x$ ) ?

$$-1 \leftrightarrow 1/2 \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad 0 \leftrightarrow 1/\sqrt{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad 1 \leftrightarrow 1/2 \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

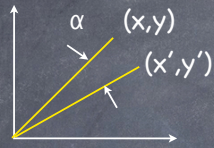


- L est hermitique  $L_{ij}=L_{ji}^*$  ( $L_{ii}$ =réel)
- trace de la matrice = somme des valeurs propres (donc ici  $\text{Tr}(L)=0$ )
- déterminant de la matrice = produit des valeurs propres (donc ici  $\det(L)=0$ )



Si on «filtre» les états  $m_y=1$  l'intensité en sortie =  $1/8$  est SUPERIEURE à l'intensité ( $=0$ ) obtenu en l'absence du «bloc  $m_y$ »

Remarque 2 : rotation d'un angle  $\alpha$  autour de Oz



$$\begin{aligned}x' &= x \cos \alpha + y \sin \alpha \\y' &= -x \sin \alpha + y \cos \alpha\end{aligned}$$

$$R_{z,\alpha}[\Phi(x, y, z)] = \Phi(x', y', z)$$

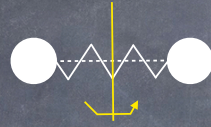
pour les petites valeurs de  $\alpha$  :  $x' = x + \alpha y$  et  $y' = -\alpha x + y$

$$R_{z,\alpha}[\Phi(x, y, z)] = \Phi(x, y, z) + \alpha \left( y \frac{\partial \Phi}{\partial x} - x \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right)$$

$$R_{z,\alpha} = Id - \frac{i\alpha}{\hbar} L_z$$

Potentiel central = invariant par ROTATION donc H commute avec  $L_z$  (et  $L_x$  et  $L_y$ ) mais les  $L_i$  ne commutent pas entre eux (les rotations ne commutent pas !)

## Molécule diatomique



Rotation

$$H = \frac{L^2}{2I}$$

$$I = m_1 d_1^2 + m_2 d_2^2$$

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}$$

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{I} \sim \frac{(10^{-34})^2}{10^{-25} \times (10^{-9})^2} \sim 1 \mu\text{eV}$$

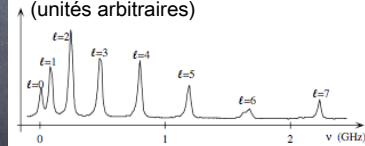
$\sim 10 \text{ mK}$  ou  $\sim 1 \text{ GHz}$

Vibrations  
spectre de  
l'oscillateur harmonique

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$$

$$\hbar\omega \sim 50 - 500 \text{ meV}$$

Signal ionique  
(unités arbitraires)



atomes froids  $\text{Cs}_2$   
Laboratoire A.Cotton - Orsay

Atome d'Hydrogène  $H = P_p^2/2M + P_e^2/2m - q^2/4\pi\epsilon_0 r$

Centre de masse :  $\vec{r}_G = \frac{M\vec{r}_p + m\vec{r}_e}{M + m} \quad \vec{r} = \vec{r}_p - \vec{r}_e$

$\vec{P}^* = \mu \frac{d\vec{r}}{dt} \left( = \frac{m\vec{P}_p - M\vec{P}_e}{m+M} \right) \quad \vec{P}_G = (m + M) \frac{d\vec{r}_G}{dt} = \vec{P}_p + \vec{P}_e$

$$H = \frac{P_G^2}{2(M + m)} + \frac{P^{*2}}{2\mu} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$H_G$

$H^*$

$\Psi(\vec{r}_G, \vec{r}) = e^{i\vec{P}_G \cdot \vec{r}_G / \hbar} \psi(r, \theta, \varphi) \quad E = P_G^2/2(m + M) + E^*$

$H^*|\psi\rangle = E^*|\psi\rangle$

$$H^* = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$



$$V_{eff} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

$$R_{n,l}(r) = \exp(-\gamma r) \times r^l \times v(r) \quad \gamma^2 = -2mE/\hbar^2$$

$$y = 2\gamma r \text{ et } k = me^2/4\pi\epsilon_0\gamma\hbar^2$$

-> une (nouvelle !) équation de Kummer

$$y \frac{d^2 v}{dy^2} + (2l+2-y) \frac{dv}{dy} - (l+1-k)v = 0$$

$$l+1-k = -n^* = \text{entier} \quad n = n^* + l + 1$$

$$E = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad \text{voir (TD)}$$

$$\gamma = \gamma_n = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar} \frac{1}{n} = \frac{1}{a_0 n} \text{ où } a_0 \text{ est le rayon de Bohr}$$

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \frac{1}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$$

$$R_{1,0} \propto e^{-r/a_0}$$

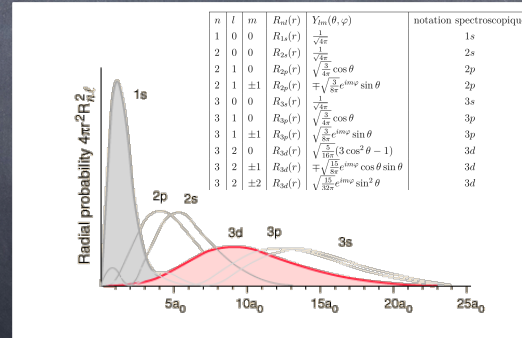
$$R_{3,0} \propto (3 - 6r/a_0 + 2(r/a_0)^2)e^{-r/3a_0}$$

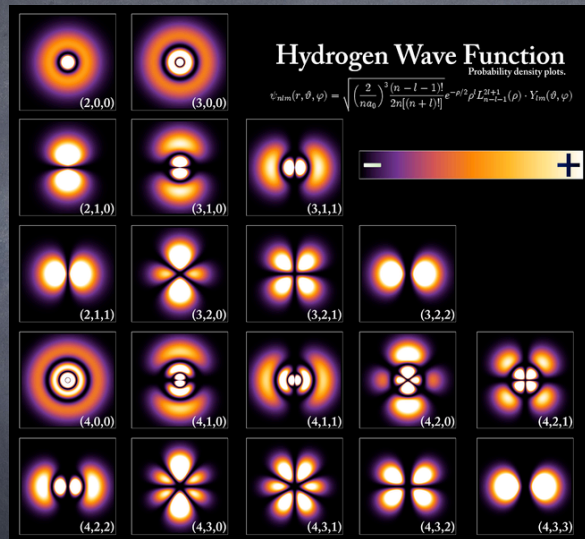
$$R_{2,0} \propto (1 - r/2a_0)e^{-r/2a_0}$$

$$R_{3,1} \propto (2 - r/a_0)(r/a_0)e^{-r/3a_0}$$

$$R_{2,1} \propto (r/a_0)e^{-r/2a_0}$$

$$R_{3,2} \propto (r/a_0)^2 e^{-r/3a_0}$$



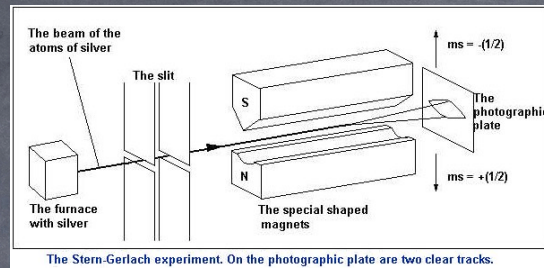


## Chapitre 5

### Spin

Spin  $1/2$   
composition de moments cinétiques





1922 (antérieur à la MQ) : faisceau d'atome ( $\text{Ag} = [46]5s^1$ )  
neutre mais avec un moment magnétique

$$\vec{F} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \text{ et } \vec{\Gamma} = \vec{\mu} \times \vec{B}$$

modèle classique  $\mu = IS\vec{k} = -\frac{qv}{2\pi r}\pi r^2\vec{k} = -\frac{q}{2m}vr\vec{k} = -\frac{q}{2m}\vec{L}$

$\mu = \gamma_0\vec{L}$  ou  $\gamma_0 = -\frac{q}{2m}$  est le rapport gyromagnétique

$$\frac{d\vec{\mu}}{dt} = \gamma_0\vec{\mu} \times \vec{B} \rightarrow \text{précession}$$

$$\vec{F} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{k}$$

direction aléatoire du moment, on s'attend à observer en mécanique classique un segment continu entre  $-\mu$  et  $+\mu$

et en mécanique quantique des valeurs quantiques correspondant à la quantification de  $L_z$  :

$2l+1$  valeurs = nombre impair =

$$\mu = m\gamma_0\hbar \sim m \times 9.310^{-24} \text{ JT}$$

mais en pratique **2 pics** avec  $\mu_B = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ JT}$

mais PAS de pic en zéro

$$m_z = 1/2 \Rightarrow \mu = \gamma_e \frac{\hbar}{2} \rightarrow \gamma_e = 2\gamma_0$$

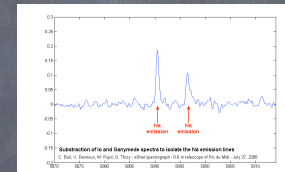
$\mu$  n'est PAS associé au moment ORBITAL de l'électron mais à un **degré de liberté INTERNE appelé SPIN**



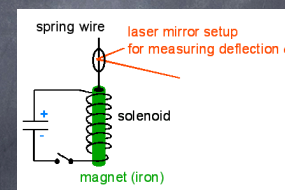
le concept de SPIN a été introduit en 1925 par Uhlenbeck & Goudsmit :  
«tout électron possède un moment cinétique intrinsèque égal à  $\hbar/2$ »

• expérience de Stern-Gerlach

- transition 2p→1s du sodium  
→ 2 Raies  
structure hyperfine liée  
au couplage spin-orbite



- Expérience de Einstein & de Haas  
déviation du miroir sous champ liée à la  
conservation du moment cinétique  
→ rapport gyromagnétique = 2



Les particules élémentaires : leptons (non soumis à l'interaction forte) = **électrons**, muons, neutrinos,... et quarks (soumis à toutes les interactions) sont toutes de spin demi-entier.

on appelle ces particules FERMIONS

mais existe-t-il des particules à spin entier ? OUI

on les appelle BOSONS, mais toutes sont des **bosons de jauge**  
= intermédiaires des interactions fondamentales

(**photon** = interaction électromagnétique, gluons = interaction forte,  
 $Z^0, W$  = interaction faible et peut-être... le boson de Higgs)

ou des bosons composites :  $He_4$ , les électrons d'une paires (de Cooper) dans les supraconducteurs, les excitons....

Remarque :  $\gamma_{proton} \sim 2.8 \frac{q}{m_p}$  et  $\gamma_{neutron} \sim -1.9 \frac{q}{m_n} \gg q/m$   
protons et neutrons sont des particules composites (quarks)



Soit un Hamiltonien de deux (ou plus généralement N) particules INDISCERNABLES :  
cet Hamiltonien est invariant par permutation des particules  $H(x_1, x_2) = H(x_2, x_1)$

Soit l'opérateur Permutation ( $P_{12}$ ) des 2 particules :  $[H, P_{12}] = 0$

H et  $P_{12}$  ont donc même vecteurs propres et  $P_{12}^2 = \text{Id}$

$\psi$  est donc soit symétrique ( $\psi(x_1, x_2) = \psi(x_2, x_1)$ )

soit antisymétrique ( $\psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$ )

Les **bosons** sont les particules de  $\Psi$  **symétriques** et les  
**fermions** les particules de  $\Psi$  **antisymétriques**

dans ce cas :  $\Psi(x_1, x_2) = \Phi_a(x_1)\Phi_b(x_2) - \Phi_a(x_2)\Phi_b(x_1)$

mais si  $\Phi_a = \Phi_b$  (même état quantique) alors  $\Psi = 0$

On ne peut pas mettre deux fermions dans le même état  
quantique (= tous nombres quantiques : n, l, m... ET spins  
identiques) = principe d'exclusion de Pauli

Remarque 1 : les particules quantiques n'obéissent pas à la statistique (classique) de Maxwell-Boltzmann mais à des statistiques quantiques spécifiques (Fermi-Dirac pour les Fermions et Bose-Einstein pour les Bosons, voir M1)

Remarque 2 : le spin n'a PAS de «représentation» classique  
vitesse de rotation de l'électron (de rayon  $r_e$ ) sur lui même ?

$$mc^2 = q/4\pi\epsilon_0 r_e \text{ et moment cinétique } J = mr_e^2 \omega / 2 = \hbar / 2 \\ \rightarrow v_{eq} = r_e \omega = [4\pi\epsilon_0 \hbar c / q^2] \times c = 137c !$$

on note  $|+ \rangle$  et  $| - \rangle$  les 2 vecteurs propres  
de valeurs propres  $\pm \hbar/2$

L'espace des spin est donc un espace de dimension 2

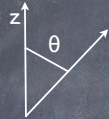
$$S_z = \hbar/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, S_x = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ et } S_y = \hbar/2 \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_i = [\hbar/2] \times \sigma_i, \text{ ou } \sigma_i = \text{matrice de Pauli}$$

Remarque : on aurait pu utiliser les opérateurs  $S_+$  et  $S_-$  pour construire  $S_x$  et  $S_y$

$$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 3\hbar^2/4 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar S_k \quad \text{= règles de commutation des moments cinétiques}$$



$$S_\theta = S_z \cos \theta + S_x \sin \theta = \hbar/2 \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

$$R_y(\theta)|+\rangle = |+\rangle_\theta$$

$$R_y(\theta) = \exp(-i\theta\sigma_y/2) = \cos(\theta/2)Id - i\sin(\theta/2)\sigma_y$$

$$|+\rangle_\theta = \cos(\theta/2)|+\rangle + \sin(\theta/2)|-\rangle$$

il y a un angle de  $180^\circ$  entre  $+z$  et  $-z$  dans l'espace réelle ( $\vec{\mu}_z \cdot \vec{\mu}_{-z} = -1$ )  
 mais dans l'espace de spins :  $|+\rangle$  et  $|-\rangle$  sont ORTHOGONAUX  
 rotation de  $\theta$  dans l'espace réel = rotation de  $\theta/2$  dans l'espace des spins

représentation complète du système :

degrés de liberté en  
TRANSLATION (x,y,z)



degré de liberté  
interne = SPIN

produit tensoriel des espaces de Hilbert correspondants

$$|\Psi\rangle = |\psi_+\rangle \otimes |+\rangle_z + |\psi_-\rangle \otimes |-\rangle_z$$

$|\psi_+|^2$  = densité de probabilité de présence dans l'état  $|+\rangle_z$

$$H = H_{\text{externe}} + H_{\text{spin}}$$

Energie cinétique  
+ potentiel central, harmonique,....  
action du champ magnétique :

$$H_{\text{spin}} = -\mu_B B_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(en prenant l'axe des z selon B)

$$V = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -g\mu_B (\vec{L} + \vec{S}) \cdot \vec{B}$$



état de spin :  $|\chi\rangle = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix}$

$$i\hbar \frac{\partial a_{\pm}}{\partial t} = -\pm \mu_B B_z a_{\pm}$$

$$\omega_0 = -\frac{qB_z}{m}$$

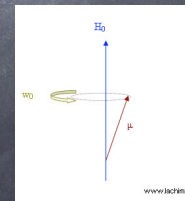
$$a_{\pm} = A_{\pm} e^{-\pm i\omega_0 t/2}$$

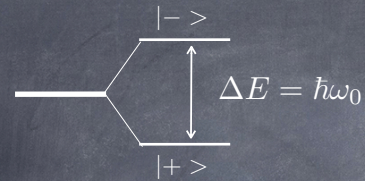
$$\langle \Psi | \mu_z | \Psi \rangle = \mu_B (A_+^2 - A_-^2) \quad = \text{constante}$$

$$\langle \Psi | \mu_x | \Psi \rangle = 2\mu_B A_+ A_- \cos(\omega_0 t)$$

$$\langle \Psi | \mu_y | \Psi \rangle = 2\mu_B A_+ A_- \sin(\omega_0 t)$$

precession de Larmor





-> principe de la RMN  
(Résonnance Magnétique Nucléaire)

En présence de  $B_z$  + champ tournant  
 $\vec{B}_1 = B_1 \cos(\omega t) \vec{u}_x + B_1 \sin(\omega t) \vec{u}_y$

$$|\omega_1| = |-\gamma B_1| \ll |\omega_0|$$

$$H_{spin} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \omega_0 & \omega_1 e^{-i\omega t} \\ \omega_1 e^{i\omega t} & -\omega_0 \end{pmatrix} \quad |\chi\rangle = \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} \text{ et } b_{\pm}(t) = a_{\pm}(t) e^{\pm i\omega t}$$

$$\boxed{\ddot{b}_{\pm} + \frac{\Omega^2}{4} b_{\pm} = 0} \quad \text{avec } \Omega^2 = (\omega - \omega_0)^2 + \omega_1^2$$

$$b_+(t) = \cos(\Omega t/2) + \alpha \sin(\Omega t/2) \text{ et } b_-(t) = \beta \sin(\Omega t/2)$$

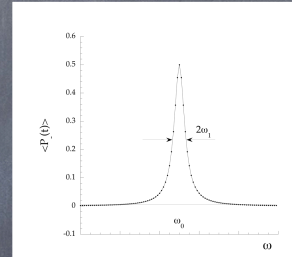
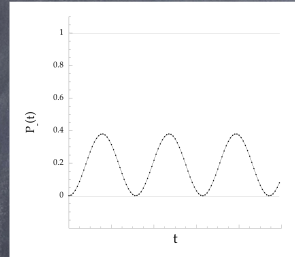
$$\text{Equation différentielle} \rightarrow \beta = -i\omega_1/\Omega \text{ et } \alpha = i(\omega - \omega_0)/\Omega$$

$$(\alpha^2 + \beta^2 = 1)$$

probabilité de transition entre les états  $|+\rangle$  (à  $t=0$ ) et  $|-\rangle$  (à  $t$ ) :

$$P_{-}(t) = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right)$$

résonance pour  $\omega = \omega_0$



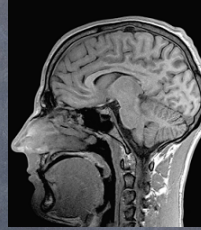
Il est extrêmement difficile en pratique de préparer tous les spins dans l'état +

A l'équilibre thermique  $\frac{\Pi_{-}}{\Pi_{+}} = \exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right)$

$\frac{\hbar\omega_0}{k_B T} \sim 10^{-5}$  à 300K et  $\omega_0 = 60\text{MHz}$  50,00025% des spins dans l'état +



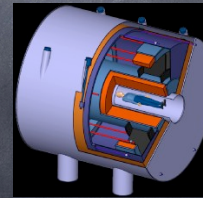
Bloch et Purcell (1946 → Prix Nobel 1952)  
1979 première image sur l'homme  
Prix Nobel de Chimie : Ernst 1991  
et Médecine : Lautenbur & Mansfield 2003



IRM : on regarde les protons de l'eau en utilisant le fait que la teneur en eau des différentes cellules (malade et saine) n'est pas la même. Un gradient de champ permet de faire des coupes et de reconstruire une image 3D

Aimant : généralement bobine supraconductrice (NbTi) de quelques Tesla (typiquement 3T)

«Neurospin» Saclay : 11.7T avec une homogénéité de  $10^{-10}$





### COMPOSITION de 2 spins 1/2

$\epsilon = \epsilon_{spin1} \otimes \epsilon_{spin2}$  = espace vectoriel de dimension  $2 \times 2 = 4$

$|\chi\rangle = |\pm\rangle_1 \otimes |\pm\rangle_2 = |\sigma_1, \sigma_2\rangle$  avec  $\sigma_1 = \pm, \sigma_2 = \pm$

$\vec{S} = \vec{S}_1 \otimes Id_2 + Id_1 \otimes \vec{S}_2$  noté simplement  $\vec{S}_1 + \vec{S}_2$

on a :  $S_z|+, +\rangle = \hbar|+, +\rangle, S_z|-, -\rangle = -\hbar|-, -\rangle$   
et  $S_z|+, -\rangle = S_z|-, +\rangle = 0$

et :  $S^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$

$$(S_1^2 + S_2^2)|\pm, \pm\rangle = \frac{3}{2}\hbar^2|\pm, \pm\rangle$$

et on a bien :  $S^2|\pm, \pm\rangle = 2\hbar^2|\pm, \pm\rangle$  ( $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$ )

$|\pm, \pm\rangle$  sont des vecteurs propres de  $S^2$  avec  $s=1$   
avec  $m = \pm 1$ , respectivement

et le vecteur propre associé à  $m_z=0$  ?

il est proportionnel à :  $S_-|+, + \rangle \propto (|-, + \rangle + |+, - \rangle)$

$$\text{i.e. } |s=1, m=0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-, + \rangle + |+, - \rangle)$$

= état intriqué

et le vecteur  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|-, + \rangle - |+, - \rangle)$

est ORTHOGONAL aux 3 vecteurs propres précédents

de plus, il vérifie :

$$S^2[\frac{1}{\sqrt{2}}(|-, + \rangle - |+, - \rangle)] = S_z[\frac{1}{\sqrt{2}}(|-, + \rangle - |+, - \rangle)] = 0$$

c'est le vecteur propre  $s=0, m=0$

en résumé :

$$2 \otimes 2 = 3 \oplus 1$$

(voir aussi TD)

on aurait aussi (pour 2 spins 1)  $3 \otimes 3 = 5 \oplus 3 \oplus 1$  (programme M1)

# retour sur l'atome d'Hydrogène

$$\epsilon = \epsilon_{\text{externe},e} \otimes \epsilon_{\text{spin},e} \otimes \epsilon_{\text{externe},p} \otimes \epsilon_{\text{spin},p}$$

état fondamental 1s

+ mouvement du centre de masse

espace de dimension 4

l'état 1s est donc dégénéré 4 fois

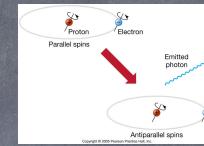
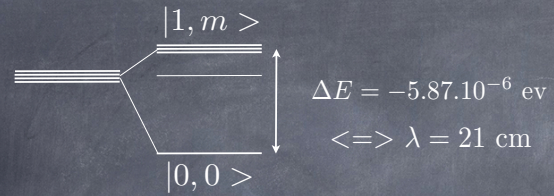
cette dégénérescence est partiellement levée par l'interaction  
dipolaire entre les spins de l'électron et du proton

$$W = -\frac{2}{3} \frac{\mu_0}{\pi a_0^3} \vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p = \frac{A}{\hbar^2} \vec{S}_e \cdot \vec{S}_p \quad A = 5.87 \cdot 10^{-6} \text{ eV} \ll 10 \text{ eV}$$

(écart typique entre niveaux)

$$\vec{S}_e \cdot \vec{S}_p = \frac{1}{2} [S^2 - S_e^2 - S_p^2] = \frac{S^2}{2} - \frac{3\hbar^2 Id}{4}$$

$$W|1, m\rangle = \frac{A}{4} \text{ et } W|0, 0\rangle = -\frac{3A}{4}$$



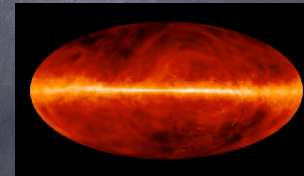
$$\Delta t \sim \hbar / \Delta E \sim 10^7 \text{ ans}$$

tous les 10 millions d'années le spin de l'électron d'un atome se retourne et il y a émission d'une raie caractéristique à 21 cm

Hydrogène = 90% des atomes du milieu interstellaire  
0.3 atome/cm<sup>3</sup> en moyenne (He = 10% restant)

matière essentielle pour la formation des  
nouvelles générations d'étoiles

effet Doppler => mouvement intergalaxie





et pour 2 électrons (atome He) :  $Z=2$

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \cancel{\frac{e^2}{r_{12}}} + \text{mvt centre de masse}$$

interaction e-e (corrélations) négligée ici ( $\rightarrow$  M2)  $E_n = -\frac{Z^2 E_1}{n^2}$

peut-on mettre les 2 électrons sur le niveau 1s ?

fermions : la fonction d'onde doit être ANTISYMETRIQUE

SPIN 1 :  $|\chi\rangle$  est symétrique ( $|+,+\rangle, |-, -\rangle$  ou  $1/\sqrt{2}(|+,-\rangle + |- ,+\rangle)$ )

donc la partie spatiale doit être antisymétrique :

$$\phi(r_1, r_2) = 1/\sqrt{2}(\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) - \phi_1(r_2)\phi_2(r_1))$$



SPIN 0 :  $|\chi\rangle$  est antisymétrique ( $1/\sqrt{2}(|+,-\rangle - |- ,+\rangle)$ )

et la partie spatiale peut dans ce cas être symétrique

$$\phi(r_1, r_2) = \phi_1(r_1)\phi_1(r_2)$$



remarque 1 : l'énergie du fondamental serait dans ce cas  
 $-2 \times 2^2 E_1 = -8 E_1$  mais expérimentalement on trouve  $-5.8 E_1$  :  
 les interactions e-e ne sont pas négligeables

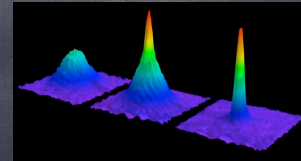
remarque 2 : pour N spins 1/2 la fonction d'onde antisymétrique peut  
 être construite à l'aide du déterminant de Slater (état fondamental)

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1)|+\rangle & \phi_1(r_1)|-\rangle & \dots & \phi_N(r_1)|+\rangle & \phi_N(r_1)|-\rangle \\ \phi_1(r_2)|+\rangle & \phi_1(r_2)|-\rangle & \dots & \phi_N(r_2)|+\rangle & \phi_N(r_2)|-\rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_1(r_N)|+\rangle & \phi_1(r_N)|-\rangle & \dots & \phi_N(r_N)|+\rangle & \phi_N(r_N)|-\rangle \end{vmatrix}$$

remarque 3 : N bosons peuvent être condensés tous sur le niveau fondamental

$$|\Psi\rangle = \phi_1(r_1)\phi_1(r_2)\dots\phi_1(r_N)|spin\rangle$$

refroidissement d'atomes par laser  
 + «évaporation» dans un piège magnétique  
 ~ qq milliers d'atomes à ~ 100 nK



## Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?

A. EINSTEIN, B. PODOLSKY AND N. ROSEN, *Institute for Advanced Study, Princeton, New Jersey*

(Received March 25, 1935)

In a complete theory there is an element corresponding to each element of reality. A sufficient condition for the reality of a physical quantity is the possibility of predicting it with certainty, without disturbing the system. In quantum mechanics in the case of two physical quantities described by non-commuting operators, the knowledge of one precludes the knowledge of the other. Then either (1) the description of reality given by the wave function in

quantum mechanics is not complete or (2) these two quantities cannot have simultaneous reality. Consideration of the problem of making predictions concerning a system on the basis of measurements made on another system that had previously interacted with it leads to the result that if (1) is false then (2) is also false. One is thus led to conclude that the description of reality as given by a wave function is not complete.

1.  
ANY serious consideration of a physical theory must take into account the distinction between the objective reality, which is independent of any theory, and the physical concepts with which the theory operates. These concepts are intended to correspond with the objective reality, and by means of these concepts we picture this reality to ourselves.

In attempting to judge the success of a physical theory, we may ask ourselves two questions: (1) "Is the theory correct?" and (2) "Is the description given by the theory complete?" It is only in the case in which positive answers may be given to both of these questions, that the concepts of the theory may be said to be satisfactory. The correctness of the theory is judged by the degree of agreement between the conclusions of the theory and human experience. This experience, which alone enables us to make inferences about reality, in physics takes the form of experiment and measurement. It is the second question that we wish to consider here, as applied to quantum mechanics.

Whatever the meaning assigned to the term *complete*, the following requirement for a complete theory seems to be a necessary one: *every element of the physical reality must have a counterpart in the physical theory*. We shall call this the condition of completeness. The second question is thus easily answered, as soon as we are able to decide what are the elements of the physical reality.

The elements of the physical reality cannot be determined by *a priori* philosophical considerations, but must be found by an appeal to results of experiments and measurements. A comprehensive definition of reality is, however, unnecessary for our purpose. We shall be satisfied with the following criterion, which we regard as reasonable. *If, without in any way disturbing a system, we can predict with certainty (i.e., with probability equal to unity) the value of a physical quantity, then there exists an element of physical reality corresponding to this physical quantity.* It seems to us that this criterion, while far from exhausting all possible ways of recognizing a physical reality, at least provides us with one

## Paradoxe EPR

une grandeur physique  
est **réelle** si elle peut  
être déterminée sans  
incertitude, sans  
perturber le système

such way, whenever the conditions set down in it occur. Regarded not as a necessary, but merely as a sufficient, condition of reality, this criterion is in agreement with classical as well as quantum-mechanical ideas of reality.

To illustrate the ideas involved let us consider the quantum-mechanical description of the behavior of a particle having a single degree of freedom. The fundamental concept of the theory is the concept of *state*, which is supposed to be completely characterized by the wave function  $\psi$ , which is a function of the variables chosen to describe the particle's behavior. Corresponding to each physical quantity  $A$  there is an operator, which may be designated by the same letter.

If  $\psi$  is an eigenfunction of the operator  $A$ , that is, if

$$A\psi = a\psi, \quad (1)$$

where  $a$  is a number, then the physical quantity  $A$  has with certainty the value  $a$  whenever the particle is in the state given by  $\psi$ . In accordance with our criterion of reality, for a particle in the state given by  $\psi$  for which Eq. (1) holds, there is an element of physical reality corresponding to the physical quantity  $A$ . Let, for example,

$$\psi = e^{i(2\pi/\lambda)x} \text{ or } e^{i2\pi p_0 x / h}, \quad (2)$$

where  $h$  is Planck's constant,  $p_0$  is some constant number, and  $x$  the independent variable. Since the operator corresponding to the momentum of the particle is

$$p = (h/2\pi i)\partial/\partial x, \quad (3)$$

we obtain

$$\psi' = p\psi = (h/2\pi i)\partial\psi/\partial x = p_0\psi. \quad (4)$$

Thus, in the state given by Eq. (2), the momentum has certainly the value  $p_0$ . It thus has meaning to say that the momentum of the particle in the state given by Eq. (2) is real.

On the other hand if Eq. (1) does not hold, we can no longer speak of the physical quantity  $A$  having a particular value. This is the case, for example, with the coordinate of the particle. The operator corresponding to it, say  $q$ , is the operator of multiplication by the independent variable. Thus,

$$q\psi = x\psi \neq a\psi. \quad (5)$$

In accordance with quantum mechanics we can only say that the relative probability that a measurement of the coordinate will give a result lying between  $a$  and  $b$  is

$$P(a, b) = \int_a^b \psi^* \psi dx = \int_a^b dx = b - a. \quad (6)$$

Since this probability is independent of  $a$ , but depends only upon the difference  $b - a$ , we see that all values of the coordinate are equally probable.

A definite value of the coordinate, for a particle in the state given by Eq. (2), is thus not predictable, but may be obtained only by a direct measurement. Such a measurement however disturbs the particle and thus alters its state. After the coordinate is determined, the particle will no longer be in the state given by Eq. (2). The usual conclusion from this in quantum mechanics is that *when the momentum of a particle is known, its coordinate has no physical reality*.

More generally, it is shown in quantum mechanics that, if the operators corresponding to two physical quantities, say  $A$  and  $B$ , do not commute, that is, if  $AB \neq BA$ , then the precise knowledge of one of them precludes such a knowledge of the other. Furthermore, any attempt to determine the latter experimentally will alter the state of the system in such a way as to destroy the knowledge of the first.

From this follows that either (1) *the quantum-mechanical description of reality given by the wave function is not complete* or (2) *when the operators corresponding to two physical quantities do not commute the two quantities cannot have simultaneous reality*. For if both of them had simultaneous reality—and thus definite values—these values would enter into the complete description, according to the condition of completeness: it then the wave function provided such a complete description of reality, it would contain these values; these would then be predictable. This not being the case, we are left with the alternatives stated.

In quantum mechanics it is usually assumed that the wave function *does* contain a complete description of the physical reality of the system in the state to which it corresponds. At first

définition d'une observable et des valeurs propres

Si la fonction d'onde est une onde plane,  $p$  est parfaitement déterminée ( $p=p_0$ ) donc «réelle»

mais on ne peut pas déterminer la position de la particule, elle n'a donc pas de «réalité»

de façon générale, si  $A$  et  $B$  ne commutent pas, les quantités physiques associées n'ont pas de réalité simultanée

la fonction d'onde contient toute l'information du système



2 particules interagissent pendant un laps de temps T pour former un état intriqué puis N'INTERAGISSENT PLUS L'évolution temporelle est donnée par l'équation de Schrodinger

On construit une fonction d'onde à 2 particules

La mesure «réduit» le paquet d'onde

sight this assumption is entirely reasonable, for the information obtainable from a wave function seems to correspond exactly to what can be measured without altering the state of the system. We shall show, however, that this assumption, together with the criterion of reality given above, leads to a contradiction.

2.

For this purpose let us suppose that we have two systems, I and II, which we permit to interact from the time  $t=0$  to  $t=T$ , after which time we suppose that there is no longer any interaction between the two parts. We suppose further that the states of the two systems before  $t=0$  were known. We can then calculate with the help of Schrödinger's equation the state of the combined system I+II at any subsequent time; in particular, for any  $t>T$ . Let us designate the corresponding wave function by  $\Psi$ . We cannot, however, calculate the state in which either one of the two systems is left after the interaction. This, according to quantum mechanics, can be done only with the help of further measurements, by a process known as the *reduction of the wave packet*. Let us consider the essentials of this process.

Let  $a_1, a_2, a_3, \dots$  be the eigenvalues of some physical quantity  $A$  pertaining to system I and  $u_1(x_1), u_2(x_1), u_3(x_1), \dots$  the corresponding eigenfunctions, where  $x_1$  stands for the variables used to describe the first system. Then  $\Psi$ , considered as a function of  $x_1$ , can be expressed as

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_n(x_2) u_n(x_1), \quad (7)$$

where  $x_2$  stands for the variables used to describe the second system. Here  $\psi_n(x_2)$  are to be regarded merely as the coefficients of the expansion of  $\Psi$  into a series of orthogonal functions  $u_n(x_1)$ . Suppose now that the quantity  $A$  is measured and it is found that it has the value  $a_2$ . It is then concluded that after the measurement the first system is left in the state given by the wave function  $u_2(x_1)$ , and that the second system is left in the state given by the wave function  $\psi_2(x_2)$ . This is the process of reduction of the wave packet: the wave packet given by the

infinite series (7) is reduced to a single term  $\psi_2(x_2)u_2(x_1)$ .

The set of functions  $u_n(x_1)$  is determined by the choice of the physical quantity  $A$ . If, instead of this, we had chosen another quantity, say  $B$ , having the eigenvalues  $b_1, b_2, b_3, \dots$  and eigenfunctions  $v_1(x_1), v_2(x_1), v_3(x_1), \dots$  we should have obtained, instead of Eq. (7), the expansion

$$\Psi(x_1, x_2) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(x_2) v_n(x_1), \quad (8)$$

where  $\varphi_n$ 's are the new coefficients. If now the quantity  $B$  is measured and is found to have the value  $b_3$ , we conclude that after the measurement the first system is left in the state given by  $v_3(x_1)$  and the second system is left in the state given by  $\varphi_3(x_2)$ .

We see therefore that, as a consequence of two different measurements performed upon the first system, the second system may be left in states with two different wave functions. On the other hand, since at the time of measurement the two systems no longer interact, no real change can take place in the second system in consequence of anything that may be done to the first system. This is, of course, merely a statement of what is meant by the absence of an interaction between the two systems. Thus, it is possible to assign two different wave functions (in our example  $\psi_2$  and  $\varphi_3$ ) to the same reality (the second system after the interaction with the first).

Now, it may happen that the two wave functions,  $\psi_2$  and  $\varphi_3$ , are eigenfunctions of two non-commuting operators corresponding to some physical quantities  $P$  and  $Q$ , respectively. That this may actually be the case can best be shown by an example. Let us suppose that the two systems are two particles, and that

$$\Psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(x_2/\lambda)(x_1 - x_2 + \pi \hbar / \lambda)} d\rho, \quad (9)$$

where  $x_1$  is some constant. Let  $A$  be the momentum of the first particle; then, as we have seen in Eq. (4), its eigenfunctions will be

$$u_p(x_1) = e^{i p x_1 / \hbar}. \quad (10)$$

corresponding to the eigenvalue  $p$ . Since we have here the case of a continuous spectrum, Eq. (7) will now be written

mais en mesurant 1, on fixe aussi l'état de 2

différentes projections sont possibles (on peut mesurer différentes grandeurs)

On part d'une superposition (continue) d'ondes planes

on mesure la quantité de mouvement de 1 (ici p)

Alors on «sait» que la particule 2 à une quantité de mouvement - p sans pour cela devoir la mesurer donc on connaît la quantité de mouvement de la particule 2 SANS LA PERTURBER, elle est donc «réelle»

de même si on mesure  $x_1$  on «connait»  $x_2$  SANS PERTURBER la particule 2, la position de 2 est donc également «réelle»

mais X et P ne commutent pas ! donc  $p_2$  et  $x_2$  ne peuvent pas être tous deux «réels» !

780

EINSTEIN, PODOLSKY AND ROSEN

$$\Psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p(x_2) u_p(x_1) dp, \quad (11)$$

where

$$\psi_p(x_2) = e^{-(i\pi/\hbar)(x_2 - p_2)} p, \quad (12)$$

This  $\psi_p$  however is the eigenfunction of the operator

$$P = (\hbar/2\pi i) \partial/\partial x_2, \quad (13)$$

corresponding to the eigenvalue  $-p$  of the momentum of the second particle. On the other hand, if  $B$  is the coordinate of the first particle, it has for eigenfunctions

$$v_x(x_1) = \delta(x_1 - x), \quad (14)$$

corresponding to the eigenvalue  $x$ , where  $\delta(x_1 - x)$  is the well-known Dirac delta-function. Eq. (8) in this case becomes

$$\Psi(x_1, x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_x(x_2) v_x(x_1) dx, \quad (15)$$

where

$$\varphi_x(x_2) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{(i\pi/\hbar)(x - x_2 + p_2)} p dp$$

$$= \hbar \delta(x - x_2 + x_1). \quad (16)$$

This  $\varphi_x$ , however, is the eigenfunction of the operator

$$Q = x_2 \quad (17)$$

corresponding to the eigenvalue  $x + x_0$  of the coordinate of the second particle. Since

$$PQ - QP = \hbar/2\pi i, \quad (18)$$

we have shown that it is in general possible for  $\psi_p$  and  $\varphi_x$  to be eigenfunctions of two noncommuting operators, corresponding to physical quantities.

Returning now to the general case contemplated in Eqs. (7) and (8), we assume that  $\psi_p$  and  $\varphi_x$  are indeed eigenfunctions of some noncommuting operators  $P$  and  $Q$ , corresponding to the eigenvalues  $p_2$  and  $q_2$ , respectively. Thus, by measuring either  $A$  or  $B$  we are in a position to predict with certainty, and without in any way disturbing the second system, either the value of the quantity  $P$  (that is  $p_2$ ) or the value of the quantity  $Q$  (that is  $q_2$ ). In accordance with our criterion of reality, in the first case we must consider the quantity  $P$  as being an element of reality, in the second case the quantity  $Q$  is an element of reality. But, as we have seen, both wave functions  $\psi_p$  and  $\varphi_x$  belong to the same reality.

Previously we proved that either (1) the quantum-mechanical description of reality given by the wave function is not complete or (2) when the operators corresponding to two physical quantities do not commute the two quantities cannot have simultaneous reality. Starting then with the assumption that the wave function does give a complete description of the physical reality, we arrived at the conclusion that two physical quantities, with noncommuting operators, can have simultaneous reality. Thus the negation of (1) leads to the negation of the only other alternative (2). We are thus forced to conclude that the quantum-mechanical description of physical reality given by wave functions is not complete.

One could object to this conclusion on the grounds that our criterion of reality is not sufficiently restrictive. Indeed, one would not arrive at our conclusion if one insisted that two or more physical quantities can be regarded as simultaneous elements of reality *only when they can be simultaneously measured or predicted*. On this point of view, since either one or the other, but not both simultaneously, of the quantities  $P$  and  $Q$  can be predicted, they are not simultaneously real. This makes the reality of  $P$  and  $Q$  depend upon the process of measurement carried out on the first system, which does not disturb the second system in any way. No reasonable definition of reality could be expected to permit this.

While we have thus shown that the wave function does not provide a complete description of the physical reality, we left open the question of whether or not such a description exists. We believe, however, that such a theory is possible.

donc la mécanique quantique ne peut pas être une théorie complète = il existe des VARIABLE CACHEES qui fixe l'état de la particule 2 (et celui de 1) dès t=T (exemple des cartes)

OU la mesure de  $x_1$  (ou  $p_1$ ) PERTURBE la particule 2 même si les deux particules n'interagissent pas : la mécanique quantique serait dans ce cas une théorie NON LOCALE

un cas équivalent : **état intriqué de spin 0**



chaque spin (a et b) est mesuré selon un axe différent ( $u_a$  et  $u_b$ )

on définit la fonction de corrélation de ces deux mesures

= moyenne (normalisée) des résultats en A et en B

En mécanique Quantique

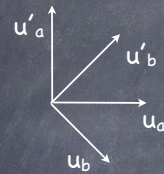
$$E(\vec{u}_a, \vec{u}_b) = \frac{4}{\hbar^2} \langle \Psi | \vec{S}_a \cdot \vec{u}_a \otimes \vec{S}_b \cdot \vec{u}_b | \Psi \rangle = -\vec{u}_a \cdot \vec{u}_b$$

Dans la théorie des variables cachées : il existe un paramètre (inconnu)  $\lambda$  qui a fixé les états de spin a et b avant la mesure (par exemple le mélange des cartes). Le résultat de la mesure en A dépend alors de  $\lambda$  et  $u_a$  mais PAS de  $u_b$  (principe de localité)

$$E(\vec{u}_a, \vec{u}_b) = \frac{4}{\hbar^2} \int P(\lambda) A(\lambda, \vec{u}_a) B(\lambda, \vec{u}_b) d\lambda$$

On s'intéresse alors à la quantité

$$S = E(\vec{u}_a, \vec{u}_b) + E(\vec{u}_a, \vec{u}'_b) + E(\vec{u}'_a, \vec{u}_b) - E(\vec{u}'_a, \vec{u}'_b)$$



la mécanique quantique prévoit (pour  $\theta=45^\circ$ )

$$S = -\sqrt{2}/2 - \sqrt{2}/2 - \sqrt{2}/2 - \sqrt{2}/2 = -2\sqrt{2}$$

et pour la théorie des variables cachées,  
la mesure ne peut donner que  $\pm\hbar/2$  donc

$$A(\lambda, \vec{u}_a)B(\lambda, \vec{u}_b) + A(\lambda, \vec{u}_a)B(\lambda, \vec{u}'_b) + A(\lambda, \vec{u}'_a)B(\lambda, \vec{u}_b) - A(\lambda, \vec{u}'_a)B(\lambda, \vec{u}'_b) = \\ A(\lambda, \vec{u}_a)(B(\lambda, \vec{u}_b) + B(\lambda, \vec{u}'_b)) + A(\lambda, \vec{u}'_a)(B(\lambda, \vec{u}_b) - B(\lambda, \vec{u}'_b)) = 2A(\lambda, \vec{u}_a)B(\lambda, \vec{u}_b)$$

$$\text{donc } S = 2E(\vec{u}_a, \vec{u}_b) \text{ et } |S| \leq 2$$

= **inégalité de Bell**, la mesure de S pour des photons polarisés

(A.Aspect, Orsay 1982) a donné  **$|S| = 2.697 \pm 0.015$**



## Cryptographie Quantique

Alice dispose de 4 états de spins possibles  $+x$ ,  $-x$ ,  $+z$  et  $-z$ , elle envoie une série de spins à Bernard selon une séquence connue d'elle seule : par exemple

$+z, -z, +x, -z, -z, -x, +x, -z$

Bernard mesure ces spins mais comme il ne connaît pas l'axe utilisé par Alice, il fait ces mesures aléatoirement et décide de mesurer selon  $z, x, x, z, x, z, x$  et  $x$  et obtient :

$+z, -x, +x, -z, -x, +z$  et  $+x$ .

Il rend public une partie (disons la moitié) des résultats, soit :  $+z, -x, +x$  et  $-z$ .

Alice compare alors les résultats obtenus selon les axes communs (ici 1, 3 et 4) et vérifie qu'ils sont TOUS identiques.

Mais si un espion avait lu la séquence (également selon des axes choisis aléatoirement). Il aurait pu choisir par exemple l'axe  $z$  pour le spin #3 et aurait obtenu (par exemple)  $+z$  (ou  $-z$  avec la probabilité  $1/2$ ).

Il aurait alors renvoyé  $+z$  à Bernard (et non pas  $+x$ ) qui aurait obtenu soit  $+x$  (en accord avec l'envoi d'Alice) soit  $-x$ . Donc si Alice a été espionnée, la moitié (en moyenne) des mesures «a priori justes» seront fausses (en fait  $1/4$  car l'espion aurait aussi pu tomber sur le bon axe). Alice pourra donc aisément vérifier si elle a été espionnée ou non (sur 500 mesures, la probabilité que l'espion n'altère pas les mesure de Bernard est de  $(3/5)^{500}$  soit  $10^{-63}$ ).

Après avoir vérifié qu'elle n'a pas été espionnée, Alice dévoile publiquement (donc à Bernard) la séquence qu'elle avait choisi pour les 500 autres spins et Bernard peut alors sélectionner les résultats utiles pour reconstruire le message

autre «application» : les ordinateurs quantiques. Le «principe» serait ici de créer des états intriqués des différents bits. Pour effectuer une opération sur une série de bit, on agirait non plus «en série» sur un bit puis le suivant mais directement sur l'état intriqué, ce qui reviendrait à faire l'opération «en parallèle» sur tous les bits de la séquences, d'où un gain de temps considérable!