Les quantons dans l'espace et le temps

Remarque : on prendra $\hbar = 1$

1) La dépendance en temps des amplitudes quantiques.

$\{u(t)\}$: "trajectoire" $\to$ évolution du système au cours du temps.

v état quelconque du système $\to$ amplitude $\langle v | u(t) \rangle$ $\to$ les variations de l'amplitude correspondent à l'évolution temporelle du système.

A) Les états stationnaires.

. u état propre de l'énergie du système $\to$ $\langle v | u(t) \rangle$ ne dépend pas de v

. $\{u_\epsilon(t)\}$: trajectoire d'un état stationnaire caractérisé par la même valeur de l'énergie

. $|\langle v | u_\epsilon(t) \rangle|^2$ indépendant de t, quel que soit v $\Rightarrow$ stationnarité de la trajectoire $\{u_\epsilon(t)\}$

$\Rightarrow \langle v | u_\epsilon(t) \rangle = K e^{i\varphi(t)}$ $K = cte$ $K \in \mathbb{R}_+$ $K = K(v, u_\epsilon)$, $\varphi(t) = -Et + \varphi_0$ $\varphi_0 \in \mathbb{R}$

. on a : $\langle v | u_\epsilon(t) \rangle = e^{-i\epsilon t} \langle v | u_\epsilon(0) \rangle$. On pose $\langle v | u_\epsilon(t) \rangle = C e^{-i\epsilon t}$, $C = K e^{i\varphi_0}$

B) États quelconques.

. w : état non stationnaire $\to$ amplitude $\langle v | w(t) \rangle$ $\to$ spectre d'énergie

. u_ϵ : état propre d'énergie E. $\Rightarrow$ $P_\epsilon = |\langle u_\epsilon | w \rangle|^2$ (indépendant du temps)

. $\langle v | w(t) \rangle = \sum_\epsilon \langle v | u_\epsilon(t) \rangle \langle u_\epsilon(t) | w(t) \rangle \to \langle v | w(t) \rangle = \sum_\epsilon e^{-i\epsilon t} \langle v | u_\epsilon(0) \rangle \langle u_\epsilon(0) | w(0) \rangle$

. On a $\langle w(0) | w(t) \rangle = \sum_\epsilon e^{-i\epsilon t} |\langle u_\epsilon(0) | w(0) \rangle|^2$; si $t = 0 \to \langle w(0) | w(t) \rangle = 1$;

si $t \neq 0$ $|\langle w(0) | w(t) \rangle| \leqslant 1$ $\Rightarrow \mathcal{P}(w(0) \leftarrow w(t)) = \sum_\epsilon \mathcal{P}_\epsilon^2 + 2 \sum\sum_{\epsilon \neq \epsilon'} \mathcal{P}_\epsilon \mathcal{P}_{\epsilon'} \cos(\epsilon - \epsilon')t$

C) Battements quantiques.

. Deux états d'énergie propres E_1 et E_2 : $\to \langle v | w(t) \rangle = \alpha_1 e^{-i\epsilon_1 t} + \alpha_2 e^{-i\epsilon_2 t}$, $\alpha_i = \langle v | u_{\epsilon_i}(0) \rangle$

$\to \mathcal{P}(v \leftarrow w(t)) = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + 2 \mathrm{Re}\, \alpha_1 \overline{\alpha_2}\, e^{i(\epsilon_2 - \epsilon_1)t} = a + b \cos((\epsilon_2 - \epsilon_1)t + \varphi)$

avec $a = |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2$, $b = 2|\alpha_1||\alpha_2|$, $\varphi = \mathrm{Arg}\, \alpha_1 - \mathrm{Arg}\, \alpha_2 \Rightarrow \nu_{bat} = \frac{1}{2\pi}(\epsilon_2 - \epsilon_1)$

. Spectroscopie par battements : Un système atomique excité sur le niveau d'énergie $\mathcal{E}_1$ (ou $\mathcal{E}_2$) émet un photon d'énergie propre $E_1 = \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_0$ (ou $E_2 = \mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_0$). Si l'état d'excitation n'est pas un état stationnaire, le rayonnement émis n'est pas monochromatique et montre des battements à la fréquence $\nu_{bat} = \frac{1}{2\pi}(\epsilon_2 - \epsilon_1) = \frac{1}{2\pi}(\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1)$

. Évolution d'un état de spin. Spin 1/2 dans un champ d'induction magnétique $\vec{\mathcal{B}}$

$\to$ moment magnétique $\vec{\mathcal{M}} = \mu \vec{S}$ $\Rightarrow$ Énergie potentielle magnétique $E = -\vec{\mathcal{M}} \cdot \vec{\mathcal{B}}$

$\mathcal{B}$ suivant Oz $\Rightarrow$ $E = -\mu \mathcal{B} S_z$. Deux états propres d'énergie coïncident avec ceux

de la composante S_z : → l'état ↑ avec la valeur propre $E_\uparrow = -\mu\mathcal{B}/2$; l'état ↓ avec $E_\downarrow = \mu\mathcal{B}/2$.
état → : état propre d'une composante de $\vec{S} \perp \vec{\mathcal{B}}$ (S_x). Prenons $w(0) = \rightarrow$, on aura donc :
$\langle \rightarrow | w(t) \rangle = \langle \rightarrow | \uparrow \rangle \langle \uparrow | \rightarrow \rangle e^{-iE_\uparrow t} + \langle \rightarrow | \downarrow \rangle \langle \downarrow | \rightarrow \rangle e^{-iE_\downarrow t} = |\langle \rightarrow | \uparrow \rangle|^2 e^{-iE_\uparrow t} + |\langle \rightarrow | \downarrow \rangle|^2 e^{-iE_\downarrow t}$

or $|\langle \rightarrow | \uparrow \rangle|^2 = |\langle \rightarrow | \downarrow \rangle|^2$ et $|\langle \rightarrow | \uparrow \rangle|^2 + |\langle \rightarrow | \downarrow \rangle|^2 = 1 \Rightarrow |\langle \rightarrow | \uparrow \rangle|^2 = |\langle \rightarrow | \downarrow \rangle|^2 = 1/2$ donc :
$\langle \rightarrow | w(t) \rangle = \cos(\mu\mathcal{B}t/2) \Rightarrow P_\rightarrow(t) = \cos^2(\mu\mathcal{B}t/2)$. De même $P_\leftarrow(t) = \sin^2(\mu\mathcal{B}t/2)$ car $P_\rightarrow(t) + P_\leftarrow(t) = 1$. Valeur moyenne de $S_x(t)$: $\langle S_x(t) \rangle = \frac{1}{2} P_\rightarrow(t) + \frac{-1}{2} P_\leftarrow(t) = \frac{1}{2}\cos(\mu\mathcal{B}t)$, et de même : $\langle S_y(t) \rangle = \frac{1}{2}\sin(\mu\mathcal{B}t)$. Le vecteur ayant pour composantes les valeurs moyennes du spin, ou "spin moyen" effectue donc un mouvement de rotation uniforme autour du champ magnétique → "précession de Larmor" – vitesse angulaire $\omega_L = \mu\mathcal{B}$.

2) Amplitudes de localisation et fonctions d'onde.

A) La fonction d'onde et la densité de probabilité.

. Fonction d'onde $\psi_w(x) = \langle u_x | w \rangle$ (amplitude de localisation spatiale, u_x état propre de localisation au point d'abscisse x). $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_w(x)|^2 dx = 1$ (normalisation)
. $|\psi_w(x)|^2$: probabilité de localisation au point x du système dans l'état w (densité)
$dP_w(x, x+dx) = |\psi_w(x)|^2 dx$
. $\langle X \rangle = \int x |\psi(x)|^2 dx$, $\langle X^2 \rangle = \int x^2 |\psi(x)|^2 dx \Rightarrow (\Delta X)^2 = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$

B) Généralisation : les grandeurs à spectre continu

$\mathcal{A}$: grandeur physique ayant un spectre continu de valeurs propres $\{\alpha\}$ et des états propres correspondants $\{u_\alpha\}$. $\langle u_\alpha | u_\beta \rangle = 0$ si $\alpha \neq \beta$ (distinction)
$\int_{\{\alpha\}} \langle v | u_\alpha \rangle \langle u_\alpha | v' \rangle d\alpha = \langle v | v' \rangle$ (complétude) $\Rightarrow \int |\langle u_\alpha | v \rangle|^2 d\alpha = 1 \Rightarrow \rho_v(\alpha) = |\langle u_\alpha | v \rangle|^2$
$\Rightarrow \langle f(\mathcal{A}) \rangle_v = \int f(\alpha)\, \rho_v(\alpha)\, d\alpha$

C) Les fonctions d'onde des états propres de la quantité de mouvement

. u_p : état propre de valeur propre p de la quantité de mouvement. $\psi_p(x) = \langle u_x | u_p \rangle$
$\Rightarrow \psi_p(x) = A e^{ipx}$
. $\psi_w(x) = \langle u_x | w \rangle = \int \langle u_x | u_p \rangle \langle u_p | w \rangle dp = \int A e^{ipx} \cdot \hat{\psi}_w(p)\, dp \Rightarrow \psi_w(x) = A \int e^{ipx} \hat{\psi}_w(p)\, dp$
et $\hat{\psi}_w(p) = A \int e^{-ipx} \psi_w(x)\, dx$. Densités : $\rho(x) = |\psi(x)|^2$; $\sigma(p) = |\hat{\psi}(p)|^2$
. $\langle P \rangle = \int p\, \sigma(p)\, dp$; $\langle P^2 \rangle = \int p^2 \sigma(p)\, dp \Rightarrow (\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2$

D) A trois dimensions

. v_r : états propres de la position . w : état quelconque . $\psi_w(\vec{r}) = \langle v_r | w \rangle$: fonction d'onde
$\to \int |\psi_w(\vec{r})|^2 \cdot d^3r = 1$, $\rho(\vec{r}) = |\psi_w(\vec{r})|^2$, $\varphi_w(r) = (4\pi)^{1/2} r \psi_w(\vec{r}) \Rightarrow \int_0^\infty |\varphi_w(r)|^2 dr = 1$
. $\langle v_r | v_p \rangle = A e^{i\vec{p}.\vec{r}} \to \psi_w(\vec{r}) = \langle v_r | w \rangle = A \int e^{i\vec{p}\vec{r}} \langle v_p | w \rangle d^3p = A \int e^{i\vec{p}\vec{r}} \tilde{\psi}_w(\vec{p}) d^3p$
. $v_{p,\eta}$: états propres, du module p, de la quantité de mouvement, et de grandeurs additionnelles (η) $\to \psi_{p,\eta}(\vec{r}) = \langle v_r | v_{p,\eta} \rangle$. $d^3\mathcal{P} = |\psi(\vec{r})|^2 d^3r$, coordonnées sphériques
$\to \vec{r}, \Omega(\theta,\varphi) \Rightarrow d^3r = r^2 dr\, d^2\Omega$, $d^2 = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi \to d^3\mathcal{P}(r,\Omega) = |\psi_{p,\eta}(r,\Omega)|^2 r^2 dr\, d^2\Omega$
$d^3\mathcal{P}(r,\Omega)$ indépendante de r pour un état radialement délocalisé $\Rightarrow \mu(r,\Omega) = |\psi_{p,\eta}(r,\Omega)|^2 r^2$
constant (en r) $\Rightarrow |\psi_{p,\eta}(r,\Omega)|^2 \propto \frac{1}{r^2} \Rightarrow \psi_{p,\eta}(r,\Omega) = \frac{B_\eta(\Omega)}{r} e^{ipr}$ (onde centrée).
. Symétrie sphérique $\Rightarrow \psi_{p,sph}(r,\Omega) = \frac{B}{r} e^{ipr}$ (onde sphérique)

3) Amplitudes de diffusion et sections efficaces

A) Fonction d'onde, flux et section efficace.

. Faisceau de quantons $\to \vec{p} \Rightarrow$ fonction d'onde : $\psi_{inc}(\vec{r}) = \psi_p(\vec{r}) = A e^{i\vec{p}.\vec{r}}$ (onde plane)
$\to \psi_{diff}(\vec{r}) = \psi_{p,\eta}(\vec{r}) = \frac{B(\Omega)}{r} e^{ipr} \Rightarrow$ Détecteur $\to \psi(\vec{r}) = \psi_{inc}(\vec{r}) + \psi_{diff}(\vec{r})$
$\Rightarrow \psi(\vec{r}) = A\left(e^{i\vec{p}.\vec{r}} + \frac{f(\Omega)}{r} e^{ipr}\right)$ avec $f(\Omega) = \frac{B(\Omega)}{A}$. $\chi(\Omega) = |f(\Omega)|^2$ (section efficace différentielle) $f(\Omega) \to$ amplitude de diffusion.

B) Diffusion Coulombienne.

$$f_{coul}(\theta) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E} \frac{1}{\sin^2(\theta/2)} e^{-i\zeta} \quad , \zeta = \gamma \ln(\sin^2(\tfrac{\theta}{2})) + \pi + 2\operatorname{Arg}\Gamma(1+i\gamma) \ , \ \gamma = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} = Z_1 Z_2 \alpha \frac{c}{v}$$

C) Le théorème optique.

. densité de probabilité : $\rho = |\psi|^2 = \rho_{inc} + \rho_{inter.} + \rho_{diff}$, $\rho_{inc} = |A|^2$, $\rho_{diff} = |B(\Omega)|^2/r^2$
$\rho_{inter} = \frac{2}{r} \operatorname{Re}\{\bar{A} B(\Omega) e^{i(pr - \vec{p}.\vec{r})}\} = \frac{2}{r} \operatorname{Re}\{\bar{A} B(\theta,\varphi) e^{ipr(1-\cos\theta)}\}$. Condition de conservation de la probabilité : $\int \rho_{inter} \cdot r^2 dr\, d^2\Omega + \int \rho_{diff}\, r^2 dr\, d^2\Omega = 0$.
. Le nombre de particules diffusées hors du faisceau incident, dans toutes les directions est égal à la diminution après diffusion du nombre de particules dans la direction initiale
. f_{av} amplitude de diffusion vers l'avant $(\theta = 0) \Rightarrow \sigma_{tot} = \frac{4\pi}{p} \operatorname{Im} f_{av}$.

D) Longueur de diffusion et indice de réfraction quantique

. Longueur de diffusion. $\to$ moment angulaire relatif de deux quantons : $L \lesssim p.d$
$\to$ à basse énergie $\left(E \ll \frac{1}{md^2}\right)$ $\lim_{p\to 0} f_p(\Omega) = -a$ $\to$ théorème optique : $\operatorname{Im} f_p(0) = p \frac{\sigma_{tot}}{4\pi}$

a est appelée longueur de diffusion (positive ou nulle) $\Rightarrow$ à énergie nulle $|\chi(\theta)|_{p=0} = a^2$ (isotropie de la diffusion) $\Rightarrow$ $\sigma|_{p=0} = 4\pi a^2$.

. Indice de réfraction quantique. Neutron monocinétique d'amplitude de localisation de type onde plane : e^{ipz} en interaction avec une mince couche de matière δ. On a :
$\varphi_{tr}(\ell) = \varphi_{inc}(\ell) + \varphi_{diff}(\ell)$; $\varphi_{inc}(\ell) = e^{-ip\ell}$; $\varphi_{diff} = \sum_{noyaux} -\frac{a}{r} e^{ipr}$; Si $\mathcal{N}$ est la densité des noyaux $\varphi_{diff} = \int -\frac{a}{r} e^{ipr}\, \mathcal{N} d^3r \Rightarrow$ si $\ell \gg \delta \Rightarrow \varphi_{diff} = -a\delta \int_0^\infty \frac{e^{ipr}}{r} 2\pi s ds$ $(r^2 = s^2 + \ell^2)$ $\Rightarrow \varphi_{diff} = -2\pi \mathcal{N} a \delta \int_\ell^\infty e^{ipr} dr = -2\pi i \mathcal{N} a \delta \frac{e^{ip\ell}}{p}$ $\Rightarrow$ d'où l'amplitude totale en $P(\ell)$: $\varphi_{tr}(\ell) = (1 - i 2\pi \frac{\mathcal{N} a}{p} \delta)\, e^{ip\ell} \Rightarrow n = 1 - 2\pi \mathcal{N} \frac{a}{p^2}$ ou $n = 1 - \frac{1}{2\pi} \mathcal{N} a \lambda^2$
si $n < 1$, $\cos\theta_c = n$, θ_c angle au dessous duquel il y réflexion totale.
$n \simeq 1 \Rightarrow \theta_c \ll 1 \Rightarrow 1 - \frac{1}{2}\theta_c^2 \simeq 1 - \frac{1}{2\pi} \mathcal{N} a \lambda^2 \Rightarrow \theta_c \simeq \lambda (\mathcal{N} a/\pi)^{1/2}$

4) Les quantons en mouvement.

A) Les amplitudes spatio-temporelles.

. $\psi_{w(t)}(x) = \langle u_x | w(t) \rangle$ ou $\psi_w(x;t) = \langle u_x | w(t) \rangle$ fonction d'onde

. $\hat{\psi}_w(p;t) = \langle u_p | w(t) \rangle$. Densité de probabilité : $\rho(x;t) = |\psi(x;t)|^2$ (localisation du quanton en x, à l'instant t)

. $\psi_w(x;t) = \langle u_x | w(t) \rangle = \sum_\epsilon \langle u_x | u_\epsilon(t) \rangle \langle u_\epsilon(t) | w(t) \rangle$, $\psi_\epsilon(x;t) = \langle u_x | u_\epsilon(t) \rangle$ (fonction d'onde de l'état stationnaire d'énergie propre E).

. $\psi_\epsilon(x;t) = e^{-i\epsilon t} \psi_\epsilon(x;0) \Rightarrow \rho_\epsilon(x;t) = |\psi_\epsilon(x;t)|^2 = |\varphi_\epsilon(x)|^2$ $(\varphi_\epsilon(x) = \psi_\epsilon(x;t))$
$\int |\varphi_\epsilon(x)|^2 dx = 1$ (normalisation). $\psi_w(x;t) = \sum_\epsilon c_\epsilon e^{-i\epsilon t} \varphi_\epsilon(x)$ avec
$c_\epsilon = \langle u_\epsilon(t) | w(t) \rangle = \langle u_\epsilon(0) | w(0) \rangle$ (constantes déterminées par l'état w)

B) Force et potentiel quantiques

Pour un quanton dans un potentiel $V(x)$: "$E = \frac{p^2}{2m} + V(x)$" (à prendre quantiquement)
Si $V(x) = V_0 = c^{te} \Rightarrow \epsilon = \frac{p^2}{2m} + V_0$ (relation quantique exacte)

C) États stationnaires dans un potentiel constant, densité et courant.

. $p_\epsilon = \sqrt{2m(\epsilon - V_0)} \Rightarrow p = \pm p_\epsilon$ (2 valeurs propres) $\Rightarrow \varphi_\epsilon(x) = \langle u_x | u_\epsilon \rangle$
$\Rightarrow \langle u_x | u_\epsilon \rangle = \langle u_x | u_{p_\epsilon} \rangle \langle u_{p_\epsilon} | u_\epsilon \rangle + \langle u_x | u_{-p_\epsilon} \rangle \langle u_{-p_\epsilon} | u_\epsilon \rangle$, avec $\langle u_x | u_{p_\epsilon} \rangle = \psi_{p_\epsilon}(x)$
et $\langle u_x | u_{-p_\epsilon} \rangle = \psi_{-p_\epsilon}(x) \Rightarrow \varphi_\epsilon(x) = a_+ e^{ip_\epsilon x} + a_- e^{-ip_\epsilon x}$ avec $a_\pm = A(\langle u_{\pm p_\epsilon} | u_\epsilon \rangle)$

. densité de probabilité : $\rho_\epsilon(x) = |\varphi_\epsilon(x)|^2 = |a_+|^2 + |a_-|^2 + 2|a_+\bar{a}_-| \cos(2p_\epsilon x + \mathrm{Arg}\,\frac{a_+}{a_-})$
(fonction non sommable), $\rho_\epsilon(x)$ non constant (modulation sinusoïdale)
$\Delta x = 1/2p_\epsilon$, $\Delta p = 2p_\epsilon \Rightarrow \Delta x \Delta p \geq 1$.
. Valeur moyenne $\rightarrow \hat{\rho}_\epsilon = |a_+|^2 + |a_-|^2 = \rho_+ + \rho_-$ (intervalle de longueur grand devant la distance caractéristique Δx)
. $\rho_\pm = |a_\pm|^2 = |A|^2 |\langle v_{\pm p_\epsilon} | v_\epsilon \rangle|^2$: au coefficient A près, densités de probabilité de transition de l'état stationnaire v_ϵ à l'un des états propres de quantité de mouvement $v_{\pm p_\epsilon}$.
. Courant de probabilité : $J = \frac{p_\epsilon}{m}(|a_+|^2 - |a_-|^2) \rightarrow R = |a_+|^2/|a_-|^2$

D) Le quanton libre et son paquet d'onde

. quanton se déplaçant dans un potentiel constant.
$\rightarrow \psi(x;t) = \int_{V_0}^{+\infty} (C_+(E)\, e^{ip_\epsilon x} + C_-(E)\, e^{-ip_\epsilon x}) e^{-iEt}\, dE$, $C_\pm(\epsilon) = c_\epsilon\, a_\pm(E)$
changement de variable $\rightarrow p = \pm p_\epsilon \Rightarrow \psi(x;t) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(p)\, e^{i(px - E_p t)}\, dp$
où $E_p = p^2/2m + V_0$, F étant déterminée par $C_\pm(\epsilon_p)$ pour $p \gtrless 0$
$\rightarrow \psi(x;t) = A \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}(p)\; e^{i(px - \epsilon_p t)}\, dp$
. Si $\hat{\psi}(p) = |\hat{\psi}(p)|\, e^{i\delta(p)} \Rightarrow \psi(x;t) = A \int_{-\infty}^{+\infty} |\hat{\psi}(p)|\, e^{i(px - \epsilon_p t + \delta(p))}\, dp$
On veut que la phase : $px - \epsilon_p t + \delta(p)$ soit stationnaire pour la valeur moyenne $p = p_0 \Rightarrow \frac{d}{dp}(px - \epsilon_p t + \delta(p))\Big|_{p=p_0} = 0 \Rightarrow x - \frac{d\epsilon_p}{dp}\Big|_{p_0} t + \frac{d\delta(p)}{dp}\Big|_{p_0} = 0$
$\Rightarrow x - vt = \text{cte} \Rightarrow v_{p_0} = \frac{d\epsilon_p}{dp}\Big|_{p_0} = \frac{p_0}{m}$, si $\tau = \frac{d\delta(p)}{dp}\Big|_{p_0}$ on a l'équation du mouvement : $x - v(t - \tau) = 0$
. On a $\psi(x;t) = \psi_{\hat{p}_0}(x;t) + \psi_{-\hat{p}_0}(x;t) \rightarrow$ vitesse de groupe v_{p_0} et $-v_{p_0}$
$\Rightarrow \rho(x;t) = |\psi(x;t)|^2 = |\psi_{\hat{p}_0}(x;t)|^2 + |\psi_{-\hat{p}_0}(x;t)|^2 + 2\,\mathrm{Re}\{\overline{\psi_{\hat{p}_0}(x;t)}\; \psi_{-\hat{p}_0}(x;t)\}$